

# **Lineare optische Eigenschaften dielektrisch strukturierter Halbleiter**

Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades

der Naturwissenschaften

(Dr. rer. nat.),

dem Fachbereich Physik

der Philipps-Universität Marburg

vorgelegt

von

**RALF EICHMANN**

aus Neubrandenburg

Marburg/Lahn 2002

Vom Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg  
als Dissertation am 02. Dezember 2002 angenommen.

Erstgutachter: Prof. Dr. P. Thomas  
Zweitgutachter: Prof. Dr. F. Gebhard

Tag der mündlichen Prüfung: 18. Dezember 2002.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Modell für eine Kette resonanter Streuer</b>	<b>7</b>
2.1	Material- und Maxwell-Gleichungen . . . . .	8
2.2	Analytische Ergebnisse . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Ergebnisse für resonante Streuensembles</b>	<b>20</b>
3.1	Transmission für $\lambda/2$ -Strukturen . . . . .	20
3.2	Transmission für $d \ll \lambda$ -Strukturen . . . . .	24
3.3	Feldintensität für $\lambda/2$ -Strukturen . . . . .	30
3.4	Feldintensität für $d \ll \lambda$ -Strukturen . . . . .	33
3.5	Intensitätsstatistik für $d \ll \lambda$ -Strukturen . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Coulomb-Wechselwirkung in photonischen Kristallen</b>	<b>42</b>
<b>5</b>	<b>Numerische Methoden für lineare Integralgleichungen</b>	<b>49</b>
5.1	Lineare Integralgleichungen . . . . .	49
5.2	Numerische Verfahren . . . . .	49
5.3	Numerische Integration . . . . .	53
5.4	Singuläre Kerne . . . . .	55
<b>6</b>	<b>Durchführung der Methode für photonische Kristalle</b>	<b>58</b>
6.1	Zwei Halbräume . . . . .	59
6.2	Kugel . . . . .	63
6.3	Zylinder mit flachem Boden . . . . .	68

6.4	Zylinder mit Halbkugel als Boden . . . . .	71
6.5	Flaches Rotationsellipsoid . . . . .	75
6.6	Zylinder mit halbem Rotationsellipsoid als Boden . . . . .	79
<b>7</b>	<b>Lineare optische Eigenschaften von Halbleiter-Quantenfilmen in der Nähe eines photonischen Kristalls</b>	<b>83</b>
7.1	Bewegungsgleichung für die lineare mikroskopische Polarisation . . . . .	83
7.2	Lokale Spektren . . . . .	88
7.3	Modellrechnung für $\epsilon_{cyl} \gg \epsilon_{matrix}$ . . . . .	92
7.4	Quantenfilm-Exzitonen in einem photonischen Kristall . . . . .	95
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>99</b>
<b>A</b>	<b>Vektorfelder</b>	<b>104</b>
<b>B</b>	<b>Elektromagnetische Potentiale</b>	<b>105</b>
<b>C</b>	<b>Details zur Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung in photonischen Kristallen</b>	<b>108</b>
C.1	Dielektrische Kugel . . . . .	108
C.2	Dielektrischer Zylinder ohne Boden . . . . .	111
C.3	Dielektrischer Zylinder mit flachem Boden . . . . .	113
C.4	Dielektrischer Zylinder mit Halbkugel . . . . .	114
C.5	Dielektrisches flaches Rotationsellipsoid . . . . .	115
C.6	Dielektrischer Zylinder mit flachem Rotationsellipsoid . . . . .	116
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>118</b>

# 1 Einleitung

Die Wechselwirkung elektromagnetischer Felder mit Ladungsträgern in Atomen, Molekülen und in Festkörpern ist die Ursache vielgestaltiger dynamischer Prozesse in diesen Systemen. Während es in der Vergangenheit darum ging, diese Vorgänge experimentell zu beobachten und theoretisch zu modellieren, ist es mittlerweile von grundlegendem wissenschaftlichen Interesse, aber auch von wirtschaftlicher Bedeutung, diese Wechselwirkung gezielt zu beeinflussen. Eine wichtige Möglichkeit dazu ist es, die Eigenschaften des elektromagnetischen Feldes kontrolliert zu modifizieren.

In dieser Arbeit werden sowohl die Eigenschaften des Lichtfeldes in periodisch strukturierten Halbleitersystemen als auch die Auswirkungen des modifizierten Charakters auf optische Eigenschaften der Proben untersucht. Die Periodizität der Systeme ist wegen der Wellennatur elektromagnetischer Felder von entscheidender Bedeutung für die Eigenschaften des Lichtfeldes. Die Wechselwirkung der Elementaranregungen in Halbleitern mit dem modifizierten elektromagnetischen Feld führt zu veränderten optischen Eigenschaften, durch die sich gezielt strukturierten Halbleitern neue Anwendungsgebiete erschließen.

## **Lokalisierung von Licht in eindimensionalen Ensembles resonanter Streuer**

In der Arbeitsgruppe "Quantenchaos" des Fachbereichs Physik der Universität Marburg wurden im Rahmen einer Doktorarbeit [1] Mikrowellen-Experimente in makroskopischen ein- und zweidimensionalen Systemen durchgeführt. Insbesondere konnte dort ein zufälliges Potential für die Mikrowellen erzeugt wer-

den, so dass Anderson-Lokalisierung [2] in derartigen Systemen studiert werden konnte. Speziell in unendlich großen eindimensionalen ungeordneten Systemen sind die Wellenfunktionen alle lokalisiert [3]. Das ist in endlich großen Systemen dann beobachtbar, wenn die Ausdehnung des Systems größer als die Lokalisierungslänge ist. Im Mikrowellen-System [1] wurden lokalisierte Wellenfunktionen erfolgreich identifiziert.

Die Motivation für den ersten Teil dieser Arbeit ist es, einen Vorschlag zur Wiederholung des Experiments in einem Halbleitersystem zu unterbreiten. Moderne Halbleiter-Epitaxieverfahren gestatten die Herstellung von niedrig-dimensionalen Systemen, die in einer Matrix eingebettet sind, z.B. von sogenannten Halbleiter-Quantenpunkten, etwa 10nm großen Bereichen unterschiedlicher Geometrie eines Materials, die in andere Materialien eingebettet sind. Sie können sowohl einzeln als auch in großer Anzahl mit Abständen im Bereich von einigen 10nm untereinander gefertigt werden. Andere bekannte Beispiele sind quasi-eindimensionale Strukturen, die sogenannten Halbleiter-Quantendrähte, sowie quasi-zweidimensionale Systeme, die sogenannten Halbleiter-Quantenfilme. Diesen drei Strukturen ist gemein, dass die Bewegung von Ladungsträgern darin gegenüber dem Volumenmaterial in einer Raumrichtung oder in mehreren Raumrichtungen stark eingeschränkt ist.

Wegen der Skalenunabhängigkeit der Maxwell-Gleichungen ist es prinzipiell möglich, ein Mikrowellenexperiment auf ein Halbleitersystem zu übertragen, wenn alle Längenskalen im System gleichartig verändert werden. Im Mikrowellen-Experiment haben die Streuer für die elektromagnetischen Wellen Abmessungen und auch Abstände im Bereich weniger Zentimeter, und die genutzten Mikrowellen haben Wellenlängen ebenfalls im Bereich weniger Zentimeter. Daher können für das Halbleiterstruktur-Experiment Licht am kurzwelligen Ende des sichtbaren Bereichs und Abstände der Strukturen untereinander im Bereich einiger 10nm bis zu wenigen 100nm genutzt werden, um die gleichen Verhältnisse zwischen den verschiedenen Län-

---

genskalen wie im Mikrowellen-Experiment einzustellen.

Anderson-Lokalisierung von Licht oder allgemeiner von klassischen Wellen ist ein in der Literatur viel diskutiertes Thema. Der Vorteil gegenüber elektronischen Systemen ist das Fehlen einer starken Wechselwirkung wie der Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen, so dass die Beschreibung realer Systeme einfacher ist. Obwohl die Lokalisierung von klassischen Wellen theoretisch vielfach bearbeitet wurde, siehe [4–10], gelang der experimentelle Nachweis neben Mikrowellenexperimenten [1, 11] auch in Halbleitern und für Licht am Rande des sichtbaren Bereichs erst vor kurzem. Dazu wurden Halbleiter in gemahlener Form genutzt, um die Streuung zu verstärken [12]. Die Interpretation der Meßwerte hinsichtlich Lokalisierung wurde kontrovers diskutiert [13].

Bei den Mikrowellenuntersuchungen [1] wurde die Lokalisierung von Wellenfunktionen durch eines von zwei Kriterien entschieden: Entweder durch fehlende Transmission am Ende einer eindimensionalen Streuerkette, wenn am Anfang der Kette angeregt wird, oder durch Untersuchung der Intensitätsverteilung der Wellenfunktionen in zweidimensionalen Systemen. Das erste Kriterium folgt unmittelbar aus den Überlegungen von Anderson [2], während das zweite Kriterium auf der Random Matrix Theory [14] beruht, die hier eine Unterscheidung zwischen delokalisierten (Porter-Thomas-Verteilung der Intensitäten) und lokalisierten Wellenfunktionen (starke Überhöhung des Auftretens kleiner Intensitäten) erlaubt.

Mit diesen Kriterien soll im ersten Teil der Arbeit eine eindimensionale Anordnung von Halbleiter-Quantenfilmen untersucht werden, um die Frage nach der Lokalisierung von Licht in einem derartigen System mit theoretischen Mitteln zu beantworten. Weiterhin können so relativ einfach Parallelen zu früheren Untersuchungen an Multiquantenfilm-Strukturen [15–17] gezogen werden.

### **Coulomb-Wechselwirkung in photonischen Kristallen**

Seit Mitte der achtziger Jahre werden die transversal-optischen Eigenschaften photonischer Kristalle intensiv untersucht [18,19]. Die besonderen Eigenschaften für transversale Lichtmoden in photonischen Kristallen wie z.B. die Zustandsdichte, die je nach Geometrie Bandlücken aufweisen kann, haben ihre Ursache in der periodischen Anordnung verschiedener dielektrischer Medien auf der Grössenskala der Lichtwellenlänge. Kombiniert man Atome, Moleküle oder Festkörper mit photonischen Kristallen, dann kann man die Wechselwirkung zwischen der Materie und dem elektromagnetischen Feld beeinflussen, weil man die Eigenschaften des elektromagnetischen Feldes durch die Geometrie des photonischen Kristalls steuern kann. Die bekanntesten Beispiele dafür sind die Verringerung der spontanen Emission einer Elementaranregung in der photonischen Bandlücke und die starke Wechselwirkung von Elementaranregungen mit Defektmoden des photonischen Kristalls.

Die Anzahl von Raumrichtungen, in denen die dielektrischen Medien periodisch angeordnet sind, bestimmen die Dimensionalität des photonischen Kristalls. Dementsprechend sind Halbleiter-Multiquantenfilme auch eindimensionale photonische Kristalle. Für zweidimensionale photonische Kristalle wurden sehr viele verschiedene Geometrien vorgeschlagen, eine der ältesten und wichtigeren davon sind Säulen oder Zylinder eines dielektrischen Materials in einem anderen in rechteckiger oder hexagonaler Anordnung, realisiert z.B. als luftgefüllte Zylinder in makroporösem Silizium [20] oder in GaAs/AlGaAs [21]. Bei dreidimensionalen photonischen Kristallen gestaltete sich die Herstellung am schwierigsten, "Yablonovite" [22] und die "Lincoln log"-Struktur [23] wurden zunächst für Mikrowellen realisiert und später für den Infrarot-Bereich verkleinert [24, 25], in dem wichtige Wellenlängen ( $1.3\mu\text{m}$  und  $1.55\mu\text{m}$ ) für die Telekommunikation liegen. Darüber hinaus wurden zwei- und dreidimensionale photonische Kristalle realisiert, deren Eigenschaften sich nach der Herstellung von außen einstellen lassen. Dazu



---

werden Flüssigkristalle in invertierten Opalen [26] oder in den Zylindern eines zweidimensionalen photonischen Kristalls [27] verwendet, so dass entweder mit externen elektrischen Feldern die Moleküle des Flüssigkristalls ausgerichtet werden können oder die Temperaturabhängigkeit der Dielektrizitätskonstanten des Flüssigkristalls ausgenutzt werden kann.

Mittlerweile haben photonische Kristalle Anwendung gefunden, z.B. in LEDs [28, 29], Lasern [30–32], Antennen [33] sowie in Glasfasern [34] und Wellenleitern [35].

Neben den durch selbst-organisiertes Wachstum und Mikrostrukturierungstechniken künstlich hergestellten photonischen Kristallen gibt es auch zwei Beispiele natürlich vorkommender photonischer Kristalle: Opale [36] und Kristallite auf den Flügeln einiger Schmetterlinge [37–39].

Die Auswirkungen der dielektrischen Strukturierung in photonischen Kristallen auf den longitudinalen Anteil des elektromagnetischen Feldes haben bisher nur wenig Beachtung gefunden [40]. Insbesondere für Kombinationen aus Halbleiter-Quantenfilmen und photonischen Kristallen ist es jedoch wichtig, die Wechselwirkung zwischen Elektronen im Quantenfilm in Anwesenheit des photonischen Kristalls korrekt zu berücksichtigen, um z.B. die Eigenschaften gebundener Elektron-Loch-Paare richtig zu beschreiben. Derartige Strukturen wurden bereits hergestellt [41, 42] und sind insbesondere für Laseranwendungen sehr wichtig.

Das Ziel des zweiten Teils dieser Arbeit ist es daher, ein System aus einem zweidimensionalen photonischen Kristall und einem Halbleiter-Quantenfilm zu modellieren und die Modifikationen des Coulomb-Potentials für geladene Teilchen im Quantenfilm zu bestimmen.

## **Aufbau der Arbeit**

Im folgenden Kapitel wird zunächst ein Modell für das Ensemble resonanter Streuer entwickelt, das auf der Realisierung mit Halbleitern beruht. Für kleine Systeme werden einige analyti-

sche Betrachtungen angestellt. Danach werden im Kapitel 3 die Ergebnisse für größere Streuensembles präsentiert, wobei zum Vergleich mit den analytischen Resultaten kleine Systeme ebenfalls behandelt werden.

Das Kapitel 4 leitet die Betrachtungen zu photonischen Kristallen ein. Dort werden das zu Grunde liegende Modellsystem beschrieben und ein allgemein gültiges Ergebnis für die Coulomb-Wechselwirkung in dielektrisch strukturierten Halbleitersystemen abgeleitet. Danach werden im Kapitel 5 kurz die notwendigen Mittel für die numerische Lösung dargelegt, die für die Ergebnisse im Kapitel 6 zum Einsatz kommen. Wichtige Details zu den Ergebnissen in diesem Kapitel, die aber den Textfluss stören würden, sind im Anhang C dargelegt. Die Betrachtungen werden durch die Untersuchung linearer optischer Eigenschaften eines Halbleiter-Quantenfilms in unmittelbarer Umgebung eines photonischen Kristalls im Kapitel 7 abgeschlossen.

## 2 Modell für eine Kette resonanter Streuer

Das Halbleitersystem, das den Betrachtungen hier zu Grunde liegen soll, ist in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt. Es besteht

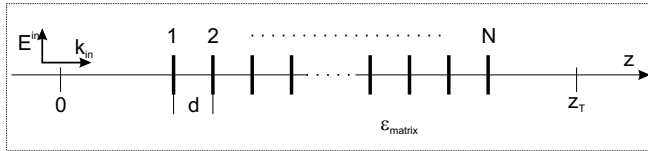


Abbildung 2.1: Modell einer eindimensionalen Anordnung von  $N$  Halbleiter-Quantenfilmen im Abstand  $d$  untereinander. Die Kette ist in einer Matrix mit der Dielektrizitätskonstanten  $\epsilon_{matrix}$  eingebettet und wird in positiver  $z$ -Richtung mit einem externen elektromagnetischen Feld  $\vec{E}^{in}$  angeregt.

aus  $N$  Quantenfilmen, die den Abstand  $d$  untereinander haben, in eindimensionaler Anordnung entlang der  $z$ -Achse. Die Umgebung bildet ein Halbleitermaterial mit der Dielektrizitätskonstanten  $\epsilon_{matrix}$ . Die Kette soll entlang der  $z$ -Achse ( $\vec{k}_{in} = (0, 0, k_z)$ ) mit einem transversalen elektromagnetischen Feld  $\vec{E}^{in}$  angeregt werden. Der Abstand  $d$  der Quantenfilme zueinander soll im Bereich der Wellenlänge  $\lambda$  des anregenden Lichts liegen, wobei  $d = \lambda/2$  und  $d \ll \lambda$  wichtige zu untersuchende Anordnungen sind. Der Ort  $z_T$  liegt hinter der Kette und dient später zur Bestimmung der Transmission.

Die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung eines ähnli-

chen Systems mit Quantenpunkten sind bereits in [43] und [44] dargelegt und sollen daher hier nur kurz wiederholt werden. Am Schluss dieses Abschnitts werden die Modifikationen für die hier betrachteten eindimensionalen Systeme dargelegt.

### 2.1 Material- und Maxwell-Gleichungen

Für die Materialgleichungen wird der Hamilton-Operator

$$H = H_{dot} + H_{licht} + H_{WW} \quad (2.1)$$

verwendet, um die lineare mikroskopische Interband-Polarisation zu bestimmen, die als Inhomogenität in die Maxwell-Gleichungen eingeht.

Im Hamilton-Operator beschreibt  $H_{dot}$  einen Quantenpunkt als Zwei-Niveau-System mit den Niveaus  $c$  und  $v$ , den zugehörigen Energien  $E_c$  und  $E_v$  sowie den Erzeugungs- ( $a^\dagger$ ) und Vernichtungsoperatoren ( $a$ ) für Elektronen in den Niveaus  $c$  und  $v$  in zweiter Quantisierung

$$H_{dot} = E_c a_c^\dagger a_c + E_v a_v^\dagger a_v \quad (2.2)$$

Die elektronische Wellenfunktion ist dabei in einem Produktsatz darstellbar als

$$\Psi(\vec{r}) = \xi(\vec{r}) \cdot (a_c u_c(\vec{r}) + a_v u_v(\vec{r})) \quad (2.3)$$

wobei  $\xi(\vec{r})$  die Einhüllende für beide Niveaus in Folge des Confinements ist sowie  $u_c(\vec{r})$  und  $u_v(\vec{r})$  die aus der Kristallstruktur folgenden Blochfunktionen der Niveaus  $c$  und  $v$  sind.

Der Term  $H_{licht}$  ist der Anteil für das anregende Licht, er wird nicht weiter betrachtet, da das elektromagnetische Feld klassisch behandelt werden soll. Der letzte Term  $H_{WW}$  steht für die Wechselwirkung zwischen anregendem Lichtfeld und dem Zwei-Niveau-System, die hier semiklassisch und in Dipol-Näherung

mit dem Dipolmatrizelement  $\vec{d}_{cv}$  der Kristall-Einheitszelle behandelt werden soll

$$H_{WW} = -\vec{E}_{dot} (\vec{d}_{cv} a_c^\dagger a_v + \vec{d}_{cv}^* a_v^\dagger a_c) \quad (2.4)$$

wobei  $\vec{E}_{dot}$  das mit der Einhüllenden  $\xi(\vec{r})$  über einen Quantenpunkt gemittelte elektromagnetische Feld ist

$$\vec{E}_{dot} = \int_{Dot} |\xi(\vec{r})|^2 \vec{E}(\vec{r}) d^3 r \quad (2.5)$$

Mit diesem Hamilton-Operator kann die Bewegungsgleichung für die mikroskopische Polarisation

$$p_{cv} = \langle a_c^\dagger a_v \rangle \quad (2.6)$$

aus der Heisenberg-Gleichung gewonnen werden. Sie lautet

$$-i \hbar \partial_t p_{cv}(t) = E_{gap} p_{cv}(t) - \vec{E}_{dot} \cdot \vec{d}_{cv}^* \quad (2.7)$$

mit der Energielücke

$$E_{gap} = E_c - E_v \quad (2.8)$$

Durch Fouriertransformation in den Frequenzraum erhält man

$$p_{cv}(\omega) = -\vec{E}_{dot} \cdot \vec{d}_{cv}^* \frac{1}{-E_{gap} + \hbar\omega + i\gamma} \quad (2.9)$$

wobei die infinitesimal kleine Konstante  $\gamma$  die Kausalität sichert und durch  $\gamma \rightarrow 0$  später aus den Gleichungen eliminiert wird.

Bestimmt man nun die makroskopische Polarisation für die Einheitszellen am Ort  $\vec{R}$  im Quantenpunkt als Erwartungswert der Dipoldichte

$$\vec{P}_{ez}(\vec{R}, t) = \langle \frac{e}{V_{ez}} \int_{ez} \Psi^\dagger(\vec{R} + \vec{r})(\vec{R} + \vec{r}) \Psi(\vec{R} + \vec{r}) \rangle \quad (2.10)$$

und nutzt (2.3) sowie die Definition des Dipolmatrixelements

$$\vec{d}_{cv} = e \int_{e_z} u_c^*(\vec{r}) \vec{r} u_v(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.11)$$

so erhält man

$$\vec{P}_{ez}(\vec{R}, t) = \frac{1}{V_{ez}} (\vec{d}_{cv} p_{cv}(t) + \vec{d}_{cv}^* p_{cv}^*(t)) |\xi(\vec{R})|^2 \quad (2.12)$$

Fouriertransformation und Mittelung über alle Einheitszellen ergibt mit der impliziten Definition

$$\vec{P}_{dot}(\omega) = \chi_{dot}(\omega) \vec{E}_{dot}(\omega) \quad (2.13)$$

folgendes Ergebnis für die Suszeptibilität  $\chi_{dot}(\omega)$  des Quantenpunkts

$$\chi_{dot}(\omega) = -\frac{|\vec{d}_{cv}|^2}{V_{dot}} \left( \frac{1}{-E_{gap} + \hbar\omega + i\gamma} - \frac{1}{E_{gap} + \hbar\omega + i\gamma} \right) \mathbf{1} \quad (2.14)$$

wobei  $\chi_{dot}(\omega)$  Tensorcharakter hat,  $\mathbf{1}$  die tensorielle 1 ist, sowie  $V_{dot}$  das Volumen eines Quantenpunktes bezeichnet.

Nun muss noch das elektromagnetische Feld mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen bestimmt werden. Die Maxwell-Gleichung für das volle  $\vec{E}$ -Feld

$$(\nabla \times \nabla \times + \varepsilon \frac{1}{c^2} \partial_t^2) \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{4\pi}{c^2} \partial_t^2 \vec{P}(\vec{r}, t) \quad (2.15)$$

kann durch Fourier-Transformation und mit Hilfe des Green-schen Tensors, in Komponentenschreibweise

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{mn}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = \\ - \left( \delta_{mn} - \frac{1 - ikD}{k^2 D^2} \delta_{mn} - \frac{-3 + 3ikD + k^2 D^2}{k^2 D^4} D_m D_n \right) \frac{\exp(ikD)}{4\pi D} \end{aligned} \quad (2.16)$$

gelöst werden, wobei  $k = \sqrt{\varepsilon}\omega/c$  mit der Dielektrizitätskonstanten  $\varepsilon$  sowie der Lichtgeschwindigkeit  $c$  im Vakuum ist, und

$\vec{D} = \vec{r} - \vec{r}'$  der Abstandsvektor,  $D$  sein Betrag und  $D_m$  mit  $m \in 1, 2, 3$  seine Komponenten sind. Der Greensche Tensor erfüllt die Wellengleichung mit einer  $\delta$ -Inhomogenität

$$(-\nabla \times \nabla \times + k^2) \mathbf{G}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \mathbf{1} \quad (2.17)$$

Das  $\vec{E}$ -Feld kann dann mit der Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\vec{E}(\vec{r}, \omega) = \vec{E}^{in}(\vec{r}, \omega) - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} \int_{Dot} \mathbf{G}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) \cdot \vec{P}(\vec{r}', \omega) d^3 r' \quad (2.18)$$

bestimmt werden.

Das mittlere Feld am Quantenpunkt ist damit

$$\begin{aligned} \vec{E}_{dot}(\omega) &= \vec{E}_{dot}^{in}(\omega) - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} V_{dot} \chi_{dot}(\omega) \cdot \mathbf{G}_{dot}(\omega) \cdot \vec{E}_{dot}(\omega) \\ &= \vec{E}_{dot}^{in}(\omega) + \vec{E}_{dot}^{streu}(\omega) \end{aligned} \quad (2.19)$$

wobei der über den Quantenpunkt gemittelte Greensche Tensor  $\mathbf{G}_{dot}$  genutzt wurde, bzw.

$$\vec{E}_{dot}(\omega) = \left( \mathbf{1} + \frac{4\pi\omega^2}{c^2} V_{dot} \chi_{dot}(\omega) \cdot \mathbf{G}_{dot}(\omega) \right)^{-1} \cdot \vec{E}_{dot}^{in}(\omega) \quad (2.20)$$

Definiert man nun die renormierte Suszeptibilität  $\chi_{ren}$  bezogen nur auf das anregende Feld

$$\vec{P}_{dot}(\omega) = \chi_{ren}(\omega) \vec{E}_{dot}^{in}(\omega) \quad (2.21)$$

dann folgt

$$\chi_{ren}(\omega) = \left( \mathbf{1} + \frac{4\pi\omega^2}{c^2} V_{dot} \chi_{dot}(\omega) \cdot \mathbf{G}_{dot}(\omega) \right)^{-1} \cdot \chi_{dot}(\omega) \quad (2.22)$$

Wenn man einen geringen Shift der Resonanz vernachlässigt und nur den resonanten Term berücksichtigt, erhält man für die renormierte Suszeptibilität

$$\chi_{ren}(\omega) = -\frac{|\vec{d}_{cv}|^2}{V_{dot}} \frac{1}{-E_{gap} + \hbar\omega + i\gamma_{rad}} \mathbf{1} \quad (2.23)$$

Für dieses Ergebnis ist ein Konvergenzproblem zu lösen, das der elektrostatischen Selbstenergie eines geladenen Teilchens ähnlich ist [45], weil der Greensche Tensor (2.16) für  $\vec{r} = \vec{r}'$  divergent ist. Daher erhält man im Realteil von  $\mathbf{G}_{dot}(\omega)$  divergente Terme, die vernachlässigt werden müssen, so dass der erste nicht divergente Term die Energienormierung bestimmt. Der Imaginärteil von  $\mathbf{G}_{dot}(\omega)$  führt zur Dämpfung der Polarisation allein durch die Wechselwirkung mit dem anregenden Lichtfeld. Für die daraus resultierende Linienbreite erhält man

$$\gamma_{rad} = \frac{2}{3} \left( \frac{E_{gap}}{\hbar c} \right)^3 \sqrt{\epsilon} |\vec{d}_{cv}|^2 \quad (2.24)$$

Die renormierte Suszeptibilität (2.23) ist wegen der Kugelsymmetrie des Problems diagonal.

Die radiative Dämpfung  $\gamma_{rad}$  ist bislang die einzige Dämpfung für die Polarisation im Problem und wird daher später die Linienbreite in optischen Spektren bestimmen. Auch die Frequenz der optischen Anregung des Zwei-Niveau-Systems muss, gemessen in Einheiten von  $\gamma_{rad}$  in der Nähe der Energielücke  $E_{gap}/\hbar$  liegen, weil ansonsten auf Grund des "Resonanznenners" in der Suszeptibilität (2.23) keine nennenswerte Polarisation im Quantenpunkt entstehen kann. Aus diesen zwei Gründen fixiert  $\gamma_{rad}$  die Energieskala des Problems.

Betrachtet man im nächsten Schritt ein System aus zwei Quantenpunkten, so erhält man für die Polarisationen  $\vec{P}_{dot,1}$  und  $\vec{P}_{dot,2}$

$$\begin{aligned} \vec{P}_{dot,1} &= \chi_{ren,1} \vec{E}_{dot,1}^{in} - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} V_{dot} \mathbf{G}(0, \vec{D}) \chi_{ren,1} \vec{P}_{dot,2} \\ \vec{P}_{dot,2} &= \chi_{ren,2} \vec{E}_{dot,2}^{in} - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} V_{dot} \mathbf{G}(0, \vec{D}) \chi_{ren,2} \vec{P}_{dot,1} \end{aligned} \quad (2.25)$$

wobei sich der eine Quantenpunkt am Ort 0 und der zweite am Ort  $\vec{D}$  befindet. Verallgemeinert man diesen Fall schließlich auf  $N$  Quantenpunkte, so erhält man für die Polarisation des Quanten-



punktes mit dem Index  $i$  bei Kopplung an die  $N - 1$  anderen

$$\vec{P}_{dot,i}(\omega) = \chi_{ren,i}(\omega) \left( \vec{E}_{dot,i}^{in} - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} \sum_{j,j \neq i}^N V_{dot} \mathbf{G}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \omega) \vec{P}_{dot,j} \right) \quad (2.26)$$

Aus dieser Gleichung lässt sich ein lineares System mit  $3N$  Gleichungen gewinnen, um zuerst die Polarisationen zu bestimmen und danach mittels (2.18) das elektromagnetische Feld überall im Raum zu berechnen, wobei das Integral über einen Quantenpunkt durch ein Integral über alle  $N$  Quantenpunkte zu ersetzen ist.

### Eindimensionale Systeme

Diese Ergebnisse sollen abschließend an den eindimensionalen Fall angepaßt werden, d.h. nicht nur die Geometrie der Streuanordnung, sondern auch die Beschreibung des elektromagnetischen Feldes soll eindimensional entlang der  $z$ -Achse erfolgen. Die Motivation dafür ist die wesentlich vereinfachte Interpretation der Daten, da z.B. die Transmission an Stelle des differentiellen Streuquerschnitts untersucht werden kann. Auch die Auswertung der Amplituden gestaltet sich in einer Dimension deutlich einfacher als in zwei oder drei Dimensionen.

Die Maxwell-Gleichung lautet dann im Frequenzraum

$$(\partial_z^2 + k^2)E(0, z, \omega) = \frac{4\pi}{c^2} \omega^2 P(0, z, \omega) \quad (2.27)$$

Um das Feld mit der Lippmann-Schwinger-Gleichung (2.18) berechnen zu können, wird die Greensche Funktion für den eindimensionalen Fall benötigt

$$G(z, z', \omega) = \frac{1}{2ik} \exp(ik|z - z'|) \quad (2.28)$$

Das elektromagnetische Feld und auch Materialgrößen hängen jetzt nicht mehr von anderen Koordinaten als  $z$  ab, d.h., das System ist in  $x$ - und  $y$ -Richtung homogen. Die Streuer sind jetzt

im Sinne des ursprünglichen Modells für Halbleiterstrukturen also Quantenfilme und nicht mehr Quantenpunkte. Dies ist die wesentliche Änderung in diesem Modell gegenüber den früheren Arbeiten [43, 44]. Der Vorteil dieser Arbeiten ist die Berücksichtigung des vollen elektromagnetischen Feldes in drei Dimensionen, was die Untersuchung von Nah- und Fernfeld-Effekten sowie von Auswirkungen der Kopplung punktförmiger Streuer über longitudinale und transversale Anteile des elektromagnetischen Feldes ermöglichte.

Die radiative Dämpfung für eindimensionale Systeme kann früheren Arbeiten zu Multiquantenfilmen [15–17] entnommen werden

$$\gamma_{\text{rad}} = 2\pi |f_{\text{cv}}|^2 \frac{\omega}{c\sqrt{\epsilon}} \quad (2.29)$$

und enthält wegen der Dimensionsreduzierung die gegenüber dem 3D-Fall veränderte Oszillatorstärke  $f_{\text{cv}}$  der Resonanz.

## 2.2 Analytische Ergebnisse

Für Systeme aus wenigen Streuern kann die Lippmann-Schwinger-Gleichung (2.18) analytisch ausgewertet werden. Daher sollen hier als Vorbetrachtung und als Vergleichsmöglichkeit zu den numerischen Untersuchungen die zwei einfachsten Systeme, ein einzelner Streuer und zwei gekoppelte Streuer, im Hinblick auf das erste und einfachere Kriterium für Lokalisierung, die Transmission, behandelt werden.

### Transmission eines einzelnen Streuers

Startpunkt für die Betrachtungen eines einzelnen Streuers ist die Lippmann-Schwinger-Gleichung (2.18) bzw. (2.19), die für einen beliebigen Ort entlang der Kette und für den eindimensionalen Fall lautet

$$\vec{E}(z, \omega) \approx \vec{E}^{\text{in}}(z, \omega) - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} G(z, z_{\text{scatt}}, \omega) P_{\text{scatt}}(\omega) L_{\text{scatt}} \quad (2.30)$$

wobei in der Greenschen Funktion  $z'$  näherungsweise durch den Ort des Streuers  $z_{scatt}$  ersetzt wurde. Die Länge  $L_{scatt}$  bezeichnet die Ausdehnung des Quantenfilms in  $z$ -Richtung. Mit Hilfe der renormierten Suszeptibilität (2.23) erhält man

$$\vec{E}(z, \omega) = \vec{E}^{in}(z, \omega) - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} G(z, z_{scatt}, \omega) L_{scatt} \chi_{ren}(\omega) \vec{E}^{in}(z_{scatt}, \omega) \quad (2.31)$$

Setzt man jetzt die Ergebnisse für die Greensche Funktion (2.28), die renormierte Suszeptibilität (2.23) und die radiative Dämpfung (2.29) ein, so erhält man unter Verwendung von  $E_{gap} = \hbar\omega_0$  zunächst

$$\vec{E}(z, \omega) = \vec{E}^{in}(z, \omega) - \frac{i\gamma_{rad}}{\hbar\omega - \hbar\omega_0 + i\gamma_{rad}} \exp(ik|z - z_{scatt}|) \vec{E}^{in}(z_{scatt}, \omega) \quad (2.32)$$

und speziell für den Fall resonanter Anregung  $\omega = \omega_0$

$$\vec{E}(z, \omega) = \vec{E}^{in}(z, \omega) - \exp(ik|z - z_{scatt}|) \vec{E}^{in}(z_{scatt}, \omega) \quad (2.33)$$

Nimmt man als anregendes Feld eine ebene Welle an

$$\vec{E}^{in}(z, \omega) = \vec{E}_0^{in} \exp(ikz) \quad (2.34)$$

dann bedeutet dies für  $z > z_{scatt}$

$$\begin{aligned} \vec{E}(z, \omega) &= \vec{E}_0^{in} \exp(ikz) - \vec{E}_0^{in} \exp(ikz) \exp(-ikz_{scatt}) \exp(ikz_{scatt}) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.35)$$

also eine perfekte destruktive Interferenz des eingestrahnten mit dem gestreuten elektromagnetischen Feld. Damit ist die Transmission eines resonant mit einer ebenen Welle angeregten Zwei-Niveau-Systems in einem eindimensionalen System gleich Null.

Für die Reflexion muss die Auswertung an einem Ort  $z$  mit  $z < z_{scatt}$  und in Gegenrichtung bezogen auf die Einstrahlrichtung

vorgenommen werden, also ist  $|z - z_{scatt}| = z_{scatt} - z$ . Damit lautet das Ergebnis für das reflektierte Feld

$$\begin{aligned}\vec{E}_r(z, \omega) &= -\vec{E}_0^{in} \exp(ikz_{scatt}) \exp(-ikz) \exp(ikz_{scatt}) \\ &= -\vec{E}_0^{in} \exp(2ikz_{scatt}) \exp(-ikz)\end{aligned}\quad (2.36)$$

### Transmissionsspektren zweier gekoppelter Streuer

Durch die Auswertung der Gleichung (2.30) sollen jetzt einige Eigenschaften eines Systems aus zwei gekoppelten Streuern untersucht werden. Die Verallgemeinerung der Gleichung für mehrere Streuer lautet

$$\begin{aligned}\vec{E}(z, \omega) &\approx \vec{E}^{in}(z, \omega) - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} \sum_i L_{scatt} G(z, z_i, \omega) P_i(\omega) \\ &= \vec{E}^{in}(z, \omega) - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} \sum_i L_{scatt} G(z, z_i, \omega) \chi(\omega) \vec{E}(z_i, \omega)\end{aligned}\quad (2.37)$$

Wertet man dieses Ergebnis für  $z = z_j$  aus, so erhält man

$$\vec{E}(z_j, \omega) = \vec{E}^{in}(z_j, \omega) - \frac{4\pi\omega^2}{c^2} \sum_i L_{scatt} G(z_j, z_i, \omega) \chi(\omega) \vec{E}(z_i, \omega)\quad (2.38)$$

oder als Matrixgleichung geschrieben

$$\sum_i (\delta_{ij} + 4\pi \frac{\omega^2}{c^2} L_{scatt} G(z_j, z_i, \omega) \chi(\omega)) \vec{E}(z_i, \omega) = \vec{E}^{in}(z_j, \omega) \quad (2.39)$$

Setzt man die Ergebnisse (2.28) für die Greensche Funktion, (2.14) für die Suszeptibilität und (2.29) für die radiative Dämpfung ein, so erhält man für das Matrixelement

$$\frac{i\gamma_{rad} \exp(2\pi i |z_j - z_i|/\lambda)}{\hbar\omega - \hbar\omega_0 + i\gamma} \quad (2.40)$$

Für ein System aus zwei Streuern lautet das Gleichungssystem daher

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{i\gamma_{rad}}{\hbar\omega - \hbar\omega_0 + i\gamma} & \frac{i\gamma_{rad} \exp(2\pi iz_{12}/\lambda)}{\hbar\omega - \hbar\omega_0 + i\gamma} \\ \frac{i\gamma_{rad} \exp(2\pi iz_{21}/\lambda)}{\hbar\omega - \hbar\omega_0 + i\gamma} & 1 + \frac{i\gamma_{rad}}{\hbar\omega - \hbar\omega_0 + i\gamma} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E(z_1, \omega) \\ E(z_2, \omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E^{in}(z_1, \omega) \\ E^{in}(z_2, \omega) \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

Um die Resonanzen dieses Systems aus zwei gekoppelten Streuern zu finden, müssen die Frequenzen  $\omega_R$  bestimmt werden, für die die Determinante der Matrix Null ist. Für solche Frequenzen führen kleinste Störungen in der Anregung sofort zu großen Änderungen der verschiedenen  $E(z_i, \omega)$ . Da für zwei Streuer  $z_{12} = |z_1 - z_2| = z_{21}$  ist, erhält man aus der Forderung an die Determinante

$$(\hbar\omega_R - \hbar\omega_0 + i\gamma + i\gamma_{rad})^2 + \gamma_{rad}^2 \exp(4\pi iz_{12}/\lambda) = 0 \quad (2.42)$$

und damit für die Resonanz

$$\hbar\omega_R = \hbar\omega_0 - i\gamma - i\gamma_{rad} \pm i\gamma_{rad} \exp(2\pi iz_{12}/\lambda) \quad (2.43)$$

Betrachtet man die Resonanzen als Quasiteilchen, dann entspricht der Realteil  $\hbar\omega'_R$  der Energie des Quasiteilchens. Um die Bedeutung des Imaginärteils  $\hbar\omega''_R$  zu verdeutlichen, kann man die Fouriertransformation in den Zeitbereich heranziehen

$$E(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\omega t) E(\omega) d\omega \quad (2.44)$$

Mit  $\omega = \omega' + i\omega''$  folgt für den Exponentialfaktor

$$\exp(-i\omega t) = \exp(-i\omega' t + \omega'' t) \quad (2.45)$$

Damit entspricht der negative Imaginärteil  $-\hbar\omega''_R$  der Zerfallsrate oder der inversen Lebensdauer der Resonanz.

Die Resonanzen  $\omega_R$  sollen jetzt für einige spezielle Werte für  $z_{12}$  untersucht werden, wobei die phänomenologische Dämpfung  $\gamma$  nicht weiter berücksichtigt wird.

- $z_{12} = \lambda/2$

Der Exponentialfaktor ist in diesem Fall  $\exp(2\pi i/2) = -1$ . Damit erhält man zwei Resonanzen bei der gleichen Energie  $\hbar\omega_0$ , aber mit unterschiedlicher Breite:  $2\gamma_{rad}$  und 0. Damit gibt es in einer solchen Struktur eine optisch aktive Mode mit verdoppelter Zerfallsrate und eine optisch nicht aktive Mode. Die optische Inaktivität der zweiten Mode erklärt sich aus Gleichung (2.32): Die Linienbreite bestimmt nicht nur die Linienform (im Nenner), sondern auch die Kopplungsstärke (im Zähler). Im Spektrum ist daher nur eine Linie mit doppelter Breite zu erwarten.

- $z_{12} = \lambda/4$

Der Exponentialfaktor ist jetzt  $\exp(2\pi i/4) = i$ . Damit gibt es in diesem System zwei Resonanzen bei den Energien  $\hbar\omega_0 + \gamma_{rad}$  und  $\hbar\omega_0 - \gamma_{rad}$ , die beide die gleiche Lebensdauer haben. Das Spektrum ist daher symmetrisch, und es enthält die Überlagerung zweier Linien bei  $\hbar\omega_0 \pm \gamma_{rad}$ .

- $z_{12} = d$

In diesem allgemeinen Fall sind keine speziellen Aussagen möglich. Man erhält zwei Resonanzen

$$\hbar\omega_R = \hbar\omega_0 - i\gamma_{rad} \pm i\gamma_{rad} \exp(2\pi i d/\lambda) \quad (2.46)$$

- $z_{12} = \lambda/2 + d$  mit  $d \ll \lambda$

Der Exponentialfaktor ist hier

$$\exp(2\pi i/2 + 2\pi i d/\lambda) = -\exp(2\pi i d/\lambda) \quad (2.47)$$

Damit lautet das Ergebnis

$$\hbar\omega_R = \hbar\omega_0 - i\gamma_{rad} \mp i\gamma_{rad} \exp(2\pi i d/\lambda) \quad (2.48)$$

Damit ist das Ergebnis hier das gleiche wie beim vorherigen Fall, so dass beide Systeme die gleichen Spektren liefern sollten.

- $z_{12} = \lambda/2 - d$  mit  $d \ll \lambda$

Der Exponentialfaktor ist in diesem Fall

$$\exp(2\pi i/2 - 2\pi i d/\lambda) = -\exp(-2\pi i d/\lambda) \quad (2.49)$$

Damit liegen die Resonanzen in diesem letzten untersuchten Fall bei

$$\hbar\omega_R = \hbar\omega_0 - i\gamma_{rad} \mp i\gamma_{rad} \exp(-2\pi i d/\lambda) \quad (2.50)$$

Das Ergebnis ist dem vorherigen für  $z_{12} = \lambda/2 + d$  bis auf das Vorzeichen im Exponentialfaktor sehr ähnlich. Nutzt man die Eulersche Formel für komplexe Zahlen und die Parität der Cosinus- und Sinusfunktion, so erhält man die gleichen Lebensdauern der beiden Resonanzen, aber bezüglich  $\hbar\omega_0$  genau vertauschte Energien. Das Spektrum für diesen Fall ist deswegen ein um  $\hbar\omega_0$  gespiegeltes Spektrum des vorherigen Systems.

Nach diesen Vorbetrachtungen für Systeme mit wenigen Streuern soll die in diesem Abschnitt entwickelte Methode auf größere Systeme angewendet werden, wobei auf die analytischen Resultate dieses Abschnitts zum Test der numerischen Ergebnisse zurückgegriffen wird.

## 3 Ergebnisse für resonante Streuensembles

### 3.1 Transmission für $\lambda/2$ -Strukturen

Die Transmission  $T$  ist proportional zur Intensität des elektromagnetischen Feldes hinter der Struktur (bezogen auf die Einstrahlrichtung)

$$T(\omega) \propto |\vec{E}^{in}(\omega) + \vec{E}^{streu}(\omega)|^2 \quad (3.1)$$

Dabei sind  $\vec{E}^{in}(\omega)$  das eingestrahlte Feld und  $\vec{E}^{streu}(\omega)$  das Feld, welches durch die Polarisierung der Streuer erzeugt wird, siehe Gleichung (2.19).

#### Ensemble ohne Unordnung

Die Abbildungen 3.1 und 3.2 zeigen die Transmission für den Fall  $d = \lambda/2$ , der sogenannten Bragg-Struktur, und für Frequenzen um die Bandlücke  $E_{gap} = \hbar\omega_0$ . Dabei ist als schwarze gestrichelte Linie das Ergebnis ohne Unordnung jeweils in den vier Teilbildern a) bis d) enthalten. In diesen und allen folgenden Abbildungen dieses Kapitels ist  $\hbar = 1$  gesetzt.

Zunächst zeigen die Transmissionsspektren ohne Unordnung die symmetrische Form, die im Abschnitt 2.2 für ein System aus zwei Streuern abgeleitet wurde. Weiterhin ist die Vergrößerung der Linienbreite mit zunehmender Zahl von Streuern zu erkennen, ebenfalls im Einklang mit den Resultaten aus dem Abschnitt 2.2. Für Superradianz in Mehrfach-Quantenfilm-Strukturen ist eine zur Filmzahl proportional steigende strahlende Verbreite-



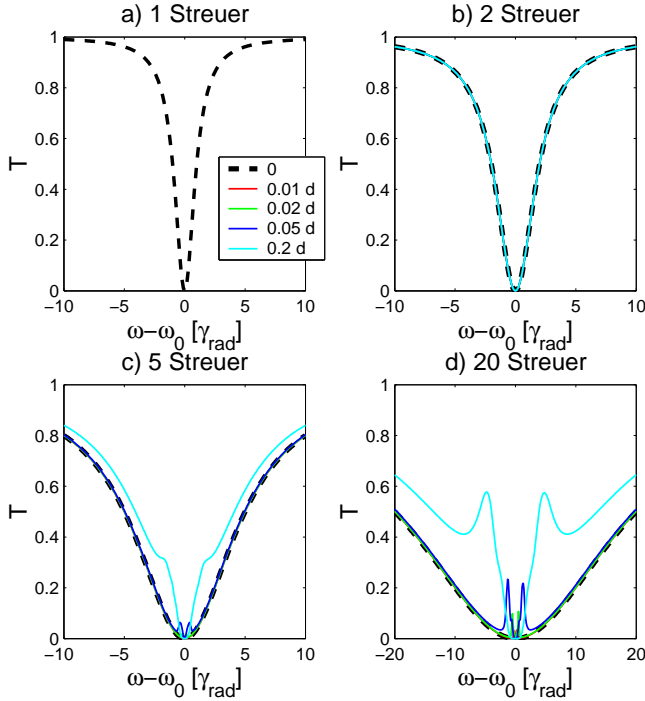


Abbildung 3.1: Transmission für  $\lambda/2$ -Strukturen mit räumlicher Unordnung. Dargestellt sind die Ergebnisse für einen Streuer (a) sowie für zwei (b), fünf (c) und 20 Streuer (d). Die Stärke der Unordnung ist, bezogen auf den mittleren Abstand  $d$ , zwischen 1% (rot) und 20% (cyan) variiert.

nung der Absorptionslinie charakteristisch [15]. Dieses reproduzierte Ergebnis ist ein wertvoller Test des Modells.

In Mehrfach-Quantenfilm-Strukturen existieren weiterhin subradiante Moden, die in der idealen  $\lambda/2$ -Struktur nicht an das Lichtfeld ankoppeln. Da die Effekte in einer Bragg-Struktur pha-

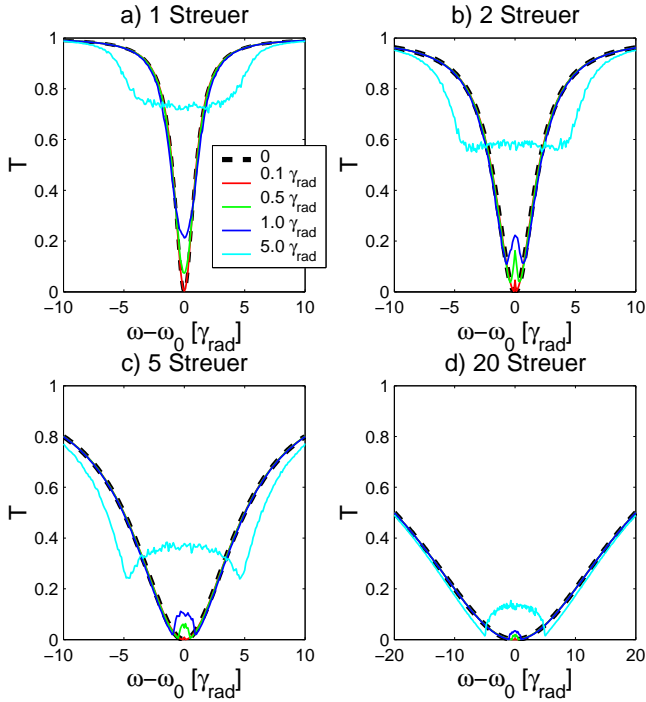


Abbildung 3.2: Transmission für  $\lambda/2$ -Strukturen mit energetischer Unordnung. Die Bildteile a) bis d) zeigen wieder die Ergebnisse für einen Streuer sowie zwei, fünf und 20 Streuer. Schwarz gestrichelt ist jeweils das Ergebnis ohne Unordnung enthalten, die farbigen Kurven stellen die Ergebnis für verschieden starke Unordnung bezogen auf die radiative Dämpfung  $\gamma_{\text{rad}}$  dar, siehe Legende.

sensitiv sind, können sie durch Unordnung teilweise aufgehoben werden, da die subradianten Moden aktiviert sind [17].

#### **Ensemble mit räumlicher oder energetischer Unordnung**

In der Beschreibung der eindimensionalen Kette von resonanten Streuern gibt es zwei Möglichkeiten, Unordnung einzuführen: Zum einen können die Streuer von ihrer eigentlichen Position leicht verschoben werden, zum zweiten kann die Bandlücke und damit die Resonanzfrequenz von ihrem mittleren Wert abweichen.

Beide Ursachen von Unordnung im Ensemble sind z.B. bei der Herstellung von Quantenpunkt-Proben sogar eher zu erwarten als eine ideale Struktur, denn die Anordnung der Streuer erfolgt auch bei selbstorganisiertem Wachstum nicht auf Atomlagen genau [46], und es gibt Größenfluktuationen der Quantenpunkte [47], die sich auf die elektronischen Eigenschaften der Quantenpunkte und damit auf die Lage der Niveaus auswirken. Entsprechendes gilt auch für Multi-Quantenfilm-Proben.

Die Abbildung 3.1 zeigt die über 1000 Realisierungen der Unordnung gemittelte Transmission für Ensembles mit räumlicher Unordnung. Man erkennt, dass die Transmission außerhalb von  $\omega_0$  größer wird, da die Phasenbeziehung zwischen den von den einzelnen Streuern erzeugten Streufeldern zerstört wird, wenn die Abstände zwischen den Quantenfilmen keine Vielfachen von  $\lambda/2$  mehr sind. Damit weichen die Transmissionslinien mit zunehmender Unordnung und mit zunehmender Zahl von Streuern immer weiter vom Fall der Superradianz ab.

Für resonante Anregung zeigt sich, dass ein derartiges Streuensemble an der Resonanz nicht transmittiert, also immer  $T = 0$  ist. Der Grund hierfür ist, wie im Abschnitt 2.2 gezeigt, Interferenz zwischen dem eingestrahnten Feld und dem Streufeld der Quantenfilme. Bei nur einem resonanten Streuer ist die Polarisation des Streuers um  $\pi/2$  gegenüber dem eingestrahnten Feld phasenverschoben, das Streufeld ist nochmals um  $\pi/2$  gegenüber der Polarisation verschoben, und es gibt keine weitere Dämpfung im System als die radiative Kopplung  $\gamma_{rad}$ . Damit interferieren die Felder vollständig destruktiv hinter dem ersten Streuer und vollständig konstruktiv in Rückwärtsrichtung vor dem er-

sten Streuer.

Ein anderes Ergebnis zeigt die Abbildung 3.2, in der die gemittelten Resultate für um  $E_{gap}$  schwankende Bandlücken dargestellt sind. Hier folgen die Resultate denen für die Konfiguration ohne Unordnung, ausgenommen den Bereich um  $\omega_0$ , in dem die Bandlücken zufällig verteilt sind. In diesem Bereich wird die Transmission größer als im idealen Fall, weil die Streuer nun bezogen auf ihre jeweilige Bandlücke individuell verschieden angeregt werden. Insbesondere ist die Transmission bei  $\omega = \omega_0$  nicht mehr Null, weil der Fall der resonanten Anregung, der dazu führen würde, hier sehr unwahrscheinlich ist. In  $\lambda/2$ -Ensembles mit energetischer Unordnung kann es also nicht mehr zur Ausbildung kollektiver Phänomene wie im idealen Fall kommen.

## 3.2 Transmission für $d \ll \lambda$ -Strukturen

Ziel der Arbeit ist es zu prüfen, ob Anderson-Lokalisierung von Licht in den hier betrachteten Strukturen möglich ist, in denen die Streuer durch ihre Resonanz charakterisiert sind, und welche Unterschiede sich zu den Mikrowellenexperimenten [1] ergeben.

Man unterscheidet bei Lokalisierung durch Unordnung zwischen "klassischer" Lokalisierung und Anderson-Lokalisierung. Das Kriterium ist der Größenvergleich zwischen der DeBroglie-Wellenlänge des untersuchten Teilchens, hier also der Wellenlänge  $\lambda$  des Photons, und der Korrelationslänge  $L_{corr}$  der Unordnung. Klassische Lokalisierung bedeutet, daß ein Teilchen in einem räumlich großen Minimum des Unordnungspotentials sitzt und ähnlich einem Quantentopf die Potentialbarrieren an beiden Seiten nicht überwinden kann. Daher lautet das Kriterium hier  $\lambda \ll L_{corr}$ . Im anderen Fall kommt es auch zur Lokalisierung im Raum, aber die Ursache ist, dass ein Elektron oder Photon durch Vielfachstreuung an Streuzentren an seiner Position bleibt, da durch destruktive Interferenz die Aufenthaltswahrscheinlich-

keit an allen anderen Orten im Raum verschwindet. Das bedeutet auch, dass Anderson-Lokalisierung ein Wellenphänomen ist und durch phasenzerstörende Prozesse, z.B. inkohärente Streuung an Phononen, zerstört werden kann. Das Kriterium lautet hier  $\lambda \gg L_{corr}$ .

Da es hier um den zweiten Fall gehen soll, sollen nun Strukturen untersucht werden, in denen die Streuer einen deutlich kleineren Abstand als in den bisher betrachteten  $\lambda/2$ -Strukturen haben.

Zu beachten ist dabei natürlich, daß einer der Modellparameter die Quantenfilmdicke ist; die lineare Ausdehnung wird durchgehend als  $L_{scatt} = 10nm$  angesetzt. Da sich die Streuer nicht berühren dürfen, machen Abstände  $d < 10nm$  keinen Sinn. Die hier und im folgenden präsentierten Rechnungen wurden mit  $d = 13nm$  durchgeführt, weitere Rechnungen mit anderen Abständen zeigen nur geringe quantitative Abweichungen.

In Abbildung 3.3 ist die Transmission für verschieden lange Streuerketten mit dem Abstand  $d = 13nm$  zwischen den einzelnen Filmen dargestellt. Man erkennt einen Energiebereich mit verschwindender Transmission um die Resonanz, der aber nicht symmetrisch um die Resonanz liegt. Stattdessen beginnt er bei  $\hbar\omega_0 = E_{gap}$  und erstreckt sich zu positiven Energien. Weiterhin wird er mit zunehmender Zahl von Streuer immer breiter. Die Ursachen für das unsymmetrische Verhalten sind die Symmetriebrechung im System durch die Anregung entlang der Streuerkette  $\vec{k}_{in} \parallel z$  und der kleine Abstand der Streuer untereinander, der nicht zur konstruktiven Interferenz wie in Bragg-Strukturen führt.

In früheren Arbeiten [43] wurde gefunden, dass bei gleichartiger Anregung zweier Streuer:  $\vec{E}_{scatt,1}^{in} = \vec{E}_{scatt,2}^{in} = \vec{E}_{scatt}^{in}$  das Absorptionsspektrum symmetrisch ist. Eine derartige Anregung entspräche hier der Einstrahlrichtung  $\vec{k}_{in} \perp z$  und wurde nicht weiter untersucht. Wenn dagegen nur einer von zwei Streuern angeregt wird:  $\vec{E}_{scatt,1}^{in} = \vec{E}_{scatt}^{in}, \vec{E}_{scatt,2}^{in} = 0$ , dann findet [43] im Absorpti-

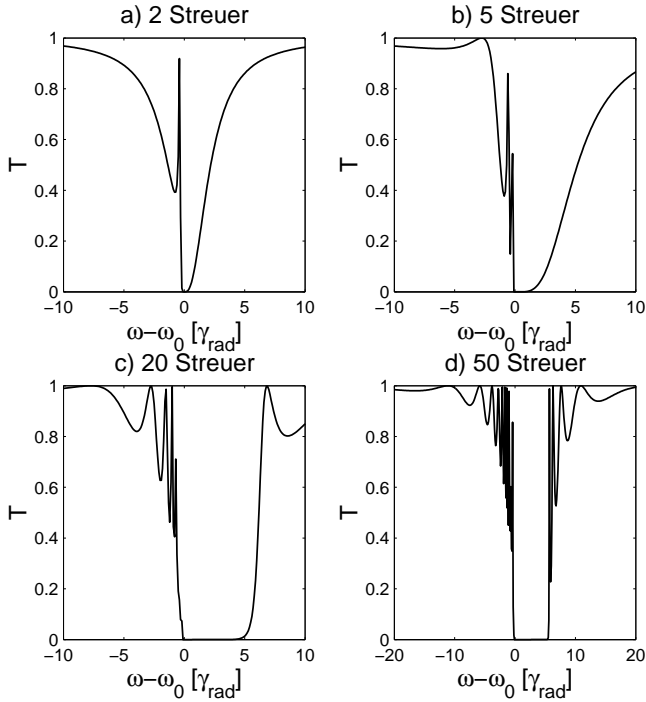


Abbildung 3.3: Transmission für Ensembles mit  $d = 13\text{nm}$  und ohne Unordnung. Deutlich ist die Asymmetrie der Ergebnisse zu erkennen, die durch die inhomogene Anregung der Streuer hervorgerufen wird.

onsspektrum zwei Resonanzen mit unterschiedlicher Breite, wobei die Breite der hinzugekommenen Resonanz, der sogenannten dunklen Mode, wesentlich kleiner ist als die Breite der auch im ersten Fall gefundenen Absorptionslinie, der sogenannten hellen Mode.

Die im Bild 3.3 dargestellten Ergebnisse wurden mit einer An-

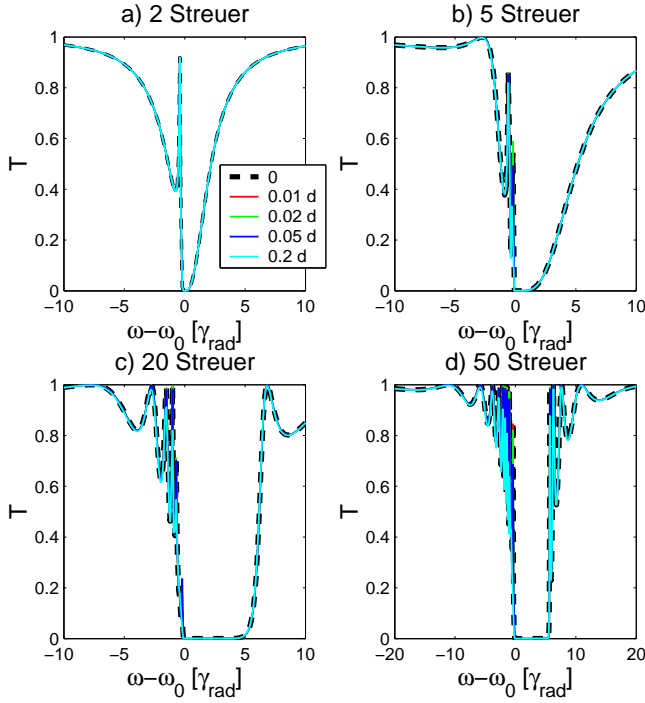


Abbildung 3.4: Transmission durch Ensembles mit  $d = 13\text{nm}$  und räumlicher Unordnung. Dargestellt sind die Ergebnisse für verschieden starke Abweichungen der Streuer von ihrem Ort im geordneten System. Das Ergebnis ist über 1000 Realisierungen der Unordnung gemittelt.

regung aller  $N$  Streuer der Form

$$E_{\text{scatt},n}^{\text{in}} = E_0^{\text{in}} \exp(ikz_n) \quad (3.2)$$

gewonnen, wobei  $z_n$  der Ort des  $n$ -ten Streuers ist. Damit ist die Anregung hier unsymmetrisch, und als Folge koppeln die Mo-

den des Systems aus  $N$  Streuern unterschiedlich stark an das externe Feld an und erzeugen so die Unsymmetrie in der Transmission. Dieses Verhalten ist besonders ausgeprägt für lange Ketten, denn bei nur wenigen Quantenfilmen ist die Anregung noch fast homogen, da der Abstand  $z_N - z_1$  zwischen dem ersten und dem letzten Streuer der Kette noch klein gegenüber der Wellenlänge  $\lambda$  ist. Diese Relation ist bei langen Ketten nicht mehr gegeben, wenn die Gesamtlänge  $z_N - z_1$  des Ensembles im Bereich einer oder mehrerer Wellenlängen liegt. Der Rückgriff auf die analytischen Resultate in Abschnitt 2.2 ermöglicht, die qualitativen Aussagen für ein System aus zwei resonanten Streuern quantitativ zu belegen. Der Exponentialfaktor in (2.46) bestimmt Real- und Imaginärteil der Resonanzen und damit Position und Linienbreite. In diesem allgemeinen Fall haben die beiden Moden keine symmetrische Position um  $\omega_0$ , und ihre Lebensdauern sind voneinander verschieden. Diese Verhältnisse sind insbesondere im Bildteil a) in Abbildung 3.3 deutlich erkennbar.

Dieses Ergebnis soll jetzt mit solchen für ungeordnete Ensembles verglichen werden. Dazu wurden Streuerketten sowohl mit energetischer als auch räumlicher Unordnung untersucht.

Theoretische Modelle für unendlich ausgedehnte eindimensionale Systeme mit Unordnung liefern, dass die Anwesenheit von Unordnung die Lokalisierung aller Wellenfunktionen verursacht [48]. In Systemen endlicher Ausdehnung können daher auch scheinbar ausgedehnte Wellenfunktionen beobachtet werden [1], wenn die Lokalisierungslänge größer als die Systemausdehnung ist. Daher kann auch bei den hier behandelten Quantenfilm-Ensembles nicht davon ausgegangen werden, dass Auswirkungen der Lokalisierung universell in den Ergebnissen beobachtbar sind, wie z.B. verschwindende Transmission durch ungeordnete Ensembles.

Die Abbildung 3.4 zeigt im Vergleich mit Abbildung 3.3, dass räumliche Unordnung die Transmission im Mittel kaum verändert. Starke energetische Unordnung, gemessen in Einheiten von  $\gamma_{rad}$ , wie in der Abbildung 3.5 hingegen erzeugt für größe-



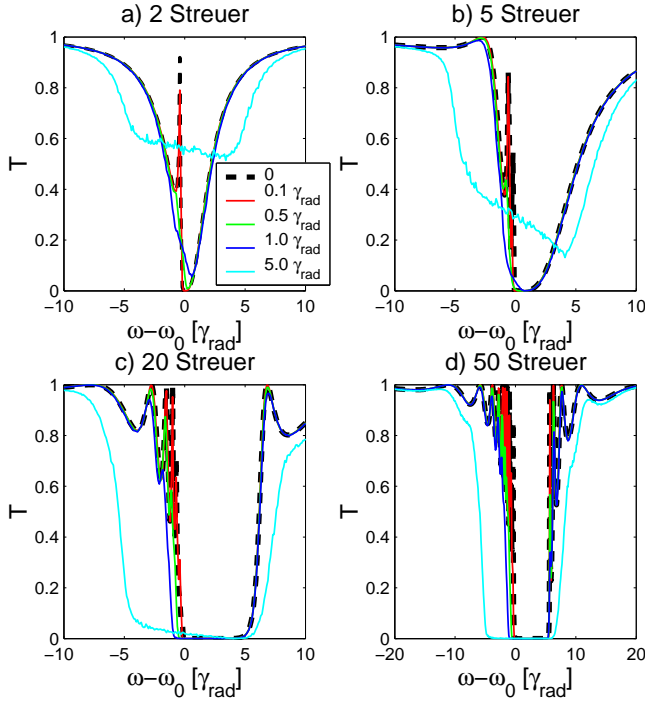


Abbildung 3.5: Transmission durch Ensembles mit  $d = 13\text{nm}$  und energetischer Unordnung. Dargestellt sind die Ergebnisse für verschieden starke Abweichungen der Resonanzfrequenz der Streuer vom idealen Wert  $1.5\text{eV}$ . Das Ergebnis ist über 1000 Realisierungen der Unordnung gemittelt.

re Streu-Ensembles ein breiteres Stopp-Band als im geordneten Fall. Es könnten daher innerhalb dieses Stopp-Bandes, aber außerhalb des Stopp-Bandes für den geordneten Fall, was in der Abbildung 3.5d) als schwarz gestrichelte Linie enthalten ist, lokalisierte Wellenfunktionen existieren. Da aber auch in Ensembles

ohne Unordnung derartige Energiebereiche mit verschwindender Transmission existieren, muss diese Vermutung durch die Untersuchung der Wellenfunktionen selbst geprüft werden.

## 3.3 Feldintensität für $\lambda/2$ -Strukturen

Wie im Abschnitt 2.1 dargestellt ist, kann mittels (2.18) das elektromagnetische Feld überall im Raum bestimmt werden, wenn die Polarisation der Streuer bekannt ist. Daher kann in ähnlicher Weise wie bei der Transmission auch das Feld und damit dessen Intensität entlang der Streuerkette berechnet werden:

$$I(\vec{r}, \omega) = |\vec{E}(\vec{r}, \omega)|^2 = |\vec{E}^{in}(\vec{r}, \omega) + \vec{E}^{streu}(\vec{r}, \omega)|^2 \quad (3.3)$$

wobei hier  $\vec{r} = (0, 0, z)$  ist. In diesem Abschnitt sollen zunächst wieder Bragg-Strukturen als Testfall untersucht werden, bevor im folgenden Abschnitt die Ensembles mit  $d \ll \lambda$  diskutiert werden.

Die Intensität hinter der Streuerkette für eine bestimmte Anregungsenergie  $\hbar\omega$  am vorher festgelegten Punkt  $z_T$  als Detektorposition kann unmittelbar mit der Transmission bei  $\omega$  verglichen werden. Dementsprechend zeigt die Abbildung 3.6, dass bei nur leicht  $(+0.2\gamma_{rad})$  neben der Resonanz  $\omega_0$  liegender Anregung die Intensität hinter der Streuerkette  $I(z \gg 0) = 0$  ist, während sie in Abbildung 3.7 deutlich größer als 0 ist, weil dort die Anregung stark nicht-resonant  $(+10\gamma_{rad})$  erfolgte. Diese Ergebnisse findet man auch in Abbildung 3.1 wieder, wenn man nur die Daten für die Ensemble ohne Unordnung berücksichtigt.

Innerhalb der Kette zeigt die Intensität ein oszillatorisches Verhalten, wobei die Intensität immer kleiner wird, je weiter hinten in der Kette der Beobachtungspunkt liegt. Während bei nur einem resonanten Streuer die Interferenz zwischen anregendem und Streufeld bei resonanten Anregung noch relativ einfach zu beschreiben ist, kann die Abnahme der Amplitude der Oszillation nicht durch eine einfache Funktion charakterisiert werden.

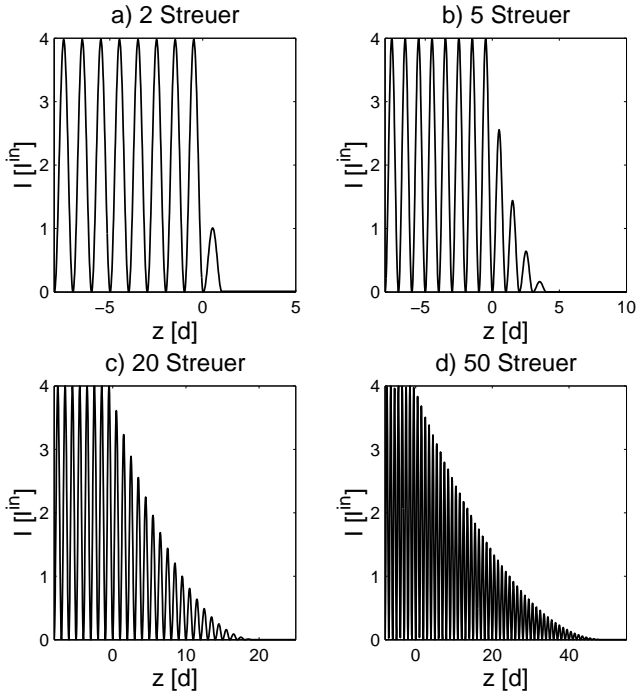


Abbildung 3.6: Intensität des Feldes für  $\lambda/2$ -Strukturen bei leicht verstimelter Anregung ( $\omega = \omega_0 + 0.2\gamma_{rad}$ ). Analog zu den Transmissionsergebnissen ist das System nahezu undurchlässig, da die Anregung fast resonant erfolgt.

Vor der Kette, also in Einstrahlrichtung rückwärts gesehen, zeigt sich bei nur leicht verstimelter Anregung (siehe Abbildung 3.6) der bisherigen Argumentation entsprechend eine fast vollständige konstruktive Interferenz des eingestrahnten mit dem gestreuten Feld, so dass sich hier eine Oszillation mit der Amplitude 4.0 bezogen auf die Intensität  $I^{in} = |E^{in}|^2$  des eingestrahnten

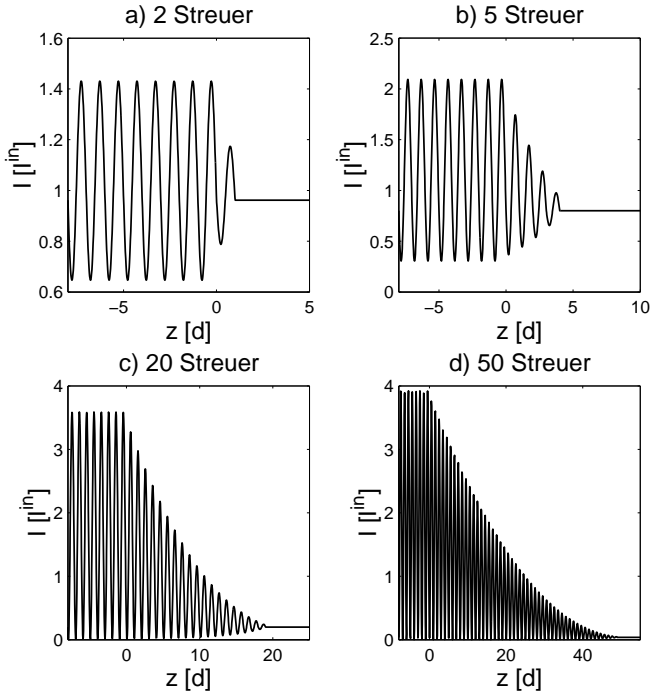


Abbildung 3.7: Intensität des Feldes für  $\lambda/2$ -Strukturen bei verstimelter Anregung ( $\omega = \omega_0 + 10\gamma_{rad}$ ). Man erkennt deutlich, insbesondere für kurze Ketten (siehe Bildteile a und b) die Transmission nahe 1, da es weit außerhalb der resonanten Anregung nicht zur destruktiven Interferenz zwischen eingestrahlt und gestreutem Feldern kommt.

Feldes ergibt. Bei stärker nicht resonanter Anregung (siehe Abbildung 3.7) nimmt die Reflexion ab und die Transmission zu, wobei diese Tendenz insbesondere bei kurzen Ketten ausgeprägt ist.

## 3.4 Feldintensität für $d \ll \lambda$ -Strukturen

Den Erläuterungen im Abschnitt 3.2 folgend, soll jetzt das elektromagnetische Feld in Strukturen mit  $d \ll \lambda$  untersucht werden. Im vorangegangenen Abschnitt 3.3 spiegelten die Ergebnisse deutlich die besondere Phasenbeziehung zwischen den Streufeldern der einzelnen Streuer wider. Eine derartige Phasenbeziehung ist hier nicht gegeben.

Die Transmissionsspektren für Systeme mit  $d \ll \lambda$  im Abschnitt 3.2 zeichneten sich durch die verbreiterten Stopp-Bänder aus, dementsprechend soll jetzt die Anregung leicht unterhalb ( $-1.0\gamma_{rad}$ ) der Resonanzfrequenz  $\omega_0$  des einzelnen Streuer ohne Unordnung erfolgen, weil Anregung bei Energien innerhalb des verbreiterten  $T = 0$ -Bereichs in Abbildung 3.5 durch Unordnung verursachte Modifikationen des elektromagnetischen Feldes ermöglichen kann.

Abbildung 3.8 zeigt Ergebnisse für Systeme ohne Unordnung und über 1000 Realisierungen gemittelte Resultate mit räumlicher Unordnung. Die gleichmäßigen Oszillationen wie in der Abbildung 3.6 sind nicht mehr vorhanden, und man erkennt die reduzierte Transmission bei räumlicher Unordnung.

Starke energetische Unordnung (siehe Abbildung 3.9) hingegen zerstört das oszillatorische Verhalten vollständig. In langen Ketten (siehe die Teilbilder c) für 20 Streuer und d) für 50 Streuer) erzeugt energetische Unordnung einzelne starke Feldüberhöhungen und reduziert die Transmission auf Null. Damit sind in diesen Resultaten Charakteristika lokalisierter Wellenfunktionen zu finden. Auch diese Resultate stammen aus einer Konfigurationsmittelung über 1000 Ensembles. Daher treten derartige Wellenfunktionen nicht nur bei bestimmten Unordnungsrealisierungen auf, sondern sind dann beobachtbar, wenn die Streuensamples Fluktuationen der Bandlücken aufweisen.

Dieser Fall soll im Folgenden mit statistischen Methoden genauer untersucht werden.

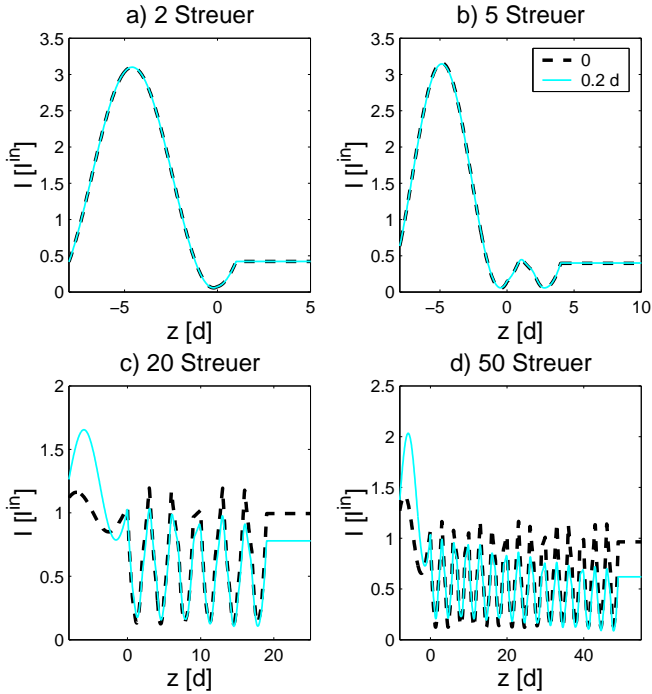


Abbildung 3.8: Feldintensität in einem  $d = 13\text{nm}$ -Ensemble mit Anregung bei  $\omega_0 - \gamma_{\text{rad}}$ . Dargestellt sind die Ergebnisse für Systeme ohne Unordnung (schwarz gestrichelte Linie) und mit räumlicher Unordnung (cyanfarbige Linie), wobei über 1000 Realisierungen gemittelt wurde.

## 3.5 Intensitätsstatistik für $d \ll \lambda$ -Strukturen

Die Ergebnisse im letzten Abschnitt zeigen gemittelte Resultate, wobei aber letztendlich immer nur erste Momente von Ver-

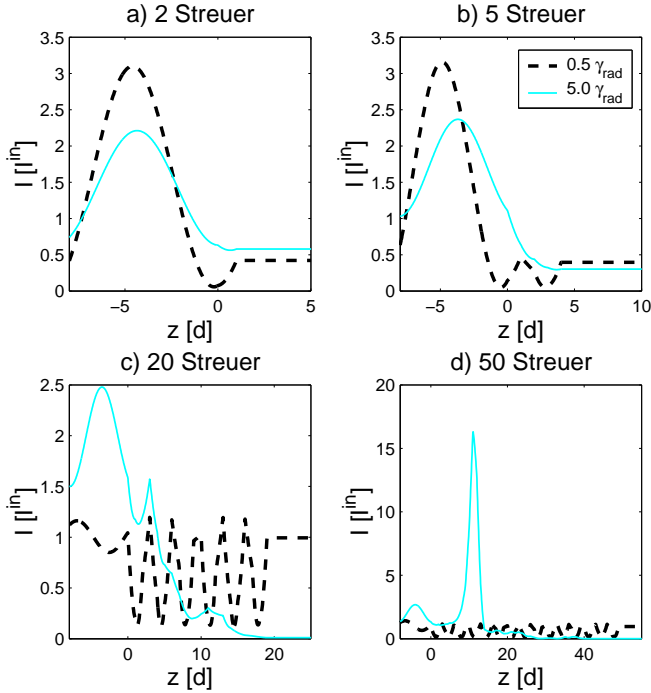


Abbildung 3.9: Feldintensität in einem  $d = 13\text{nm}$ -Ensemble mit energetischer Unordnung und Anregung bei  $\omega_0 - \gamma_{\text{rad}}$ . Für das System mit energetischer Unordnung  $\Delta\omega_0 = 5\gamma_{\text{rad}}$  brechen die unregelmäßigen Oszillation wie im geordneten Fall zusammen, und es entstehen räumlich beschränkte Bereiche mit sehr starken Feldüberhöhungen. Diese Ergebnisse sind über 1000 Realisierungen gemittelt.

teilungen berücksichtigt wurden. Eine weitere Möglichkeit, Wellenfunktionen zu klassifizieren, besteht in der Untersuchung der Häufigkeit des Auftretens der Wellenfunktionsamplituden oder

des Absolutquadrats davon, also der Intensität. Das ist in der Vergangenheit sowohl für Mikrowellensysteme [1,49,50] als auch für elektronische Systeme [51] durchgeführt worden. Die Interpretation der Ergebnisse dieser Methode ist allerdings nicht einfach, weil die Methode selbst noch weiterentwickelt wird (siehe [52,53] für einen Überblick).

Die enge Verknüpfung zwischen elektronischen und klassisch-optischen Systemen kommt durch die Analogie zwischen der Wellengleichung für ein klassisches Feld und der stationären Schrödingergleichung zustande. Die homogene Wellengleichung für ein klassisches elektrisches Feld  $\vec{E}$  in einem inhomogenen Medium lautet

$$(\nabla^2 + k_0^2(1 + n(\vec{r})))\vec{E}_\omega(\vec{r}) = 0 \quad (3.4)$$

wobei die Coulomb-Eichung

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad (3.5)$$

genutzt wurde. Die räumlichen Inhomogenität ist durch den ortsabhängigen Brechungsindex  $n(\vec{r})$  berücksichtigt, und es gilt  $k_0 = \omega/c$  für den Hintergrund.

Die stationäre Schrödingergleichung für ein Teilchen der Masse  $m$  in einem Potential  $V(\vec{r})$  lautet für eine stationäre Wellenfunktion  $\Psi_E(\vec{r})$ , zu der die Energie  $E$  gehört,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) - E\right)\Psi_E(\vec{r}) = 0 \quad (3.6)$$

Die wesentlichen Unterschiede zwischen dem elektronischen und dem klassisch-optischen System sind die skalare ( $\Psi$ ) bzw. vektorielle ( $\vec{E}$ ) Natur der untersuchten Größe und das lineare ( $E$ ) bzw. quadratische ( $k^2 = \omega^2/c^2$ ) Vorkommen des Eigenwerts. Ein wichtiger weiterer Unterschied, der aber nicht aus dem Vergleich der beiden Gleichungen folgt, ist die bereits in der Einleitung erwähnte Existenz der Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen und dem Fehlen einer äquivalenten Wechselwirkung für Licht bzw. Photonen.



In [51] werden verschiedene Unordnungsmechanismen in elektronischen Systemen theoretisch untersucht. Da Eigenschaften der Wellenfunktionen von der konkreten Art der Unordnung abhängen, sind keine allgemeinen statistischen Aussagen für lokalisierte Wellenfunktionen möglich. Auf Grund der räumlichen Lokalisierung sollten aber kleine Intensitäten "sehr häufig" auftreten, während große Werte "sehr selten" vorkommen, d.h. in den Histogrammen sollte ein deutlicher Peak für Intensitäten nahe Null erkennbar sein [1]. In der Nähe des Übergangs Lokalisierung-Delokalisierung wird eine Lognormal-Verteilung

$$f_{\log n}(I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\ln^2(I)/2) \quad (3.7)$$

der Wellenfunktionsintensitäten  $I$  gefunden, während für ausgedehnte Zustände eine Porter-Thomas-Verteilung

$$f_{PT}(I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi I}} \exp(-I/2) \quad (3.8)$$

vorausgesagt wird [51]. In [49, 50] wurde zumindest die Porter-Thomas-Verteilung der Intensitäten experimentell in Mikrowellensystemen nachgewiesen.

Die Abbildungen 3.10 und 3.11 zeigen die Häufigkeiten der im System auftretenden Intensitäten, wobei 10000 Realisierungen der Unordnung berücksichtigt wurden, um ausreichend viele Daten zur statistischen Auswertung zur Verfügung zu stellen. Zur Auswertung wurden nur Werte innerhalb der Streuerketten herangezogen. Zum Vergleich sind die Lognormal- und die Porter-Thomas-Verteilung ebenfalls dargestellt. Das System für Abbildung 3.10 wurde im erweiterten Stopp-Band (siehe Abbildung 3.5) für ungeordnete Systeme bei  $\omega_0 - \gamma_{rad}$  angeregt, während das System für Abbildung 3.11 zum Vergleich innerhalb des Stopp-Bands für geordnete und ungeordnete Systeme bei  $\omega_0 + 2\gamma_{rad}$  angeregt wurde.

Man erkennt sofort, dass die Daten in keinem der Fälle der Lognormal-Verteilung folgen, also hier nicht Wellenfunktionen

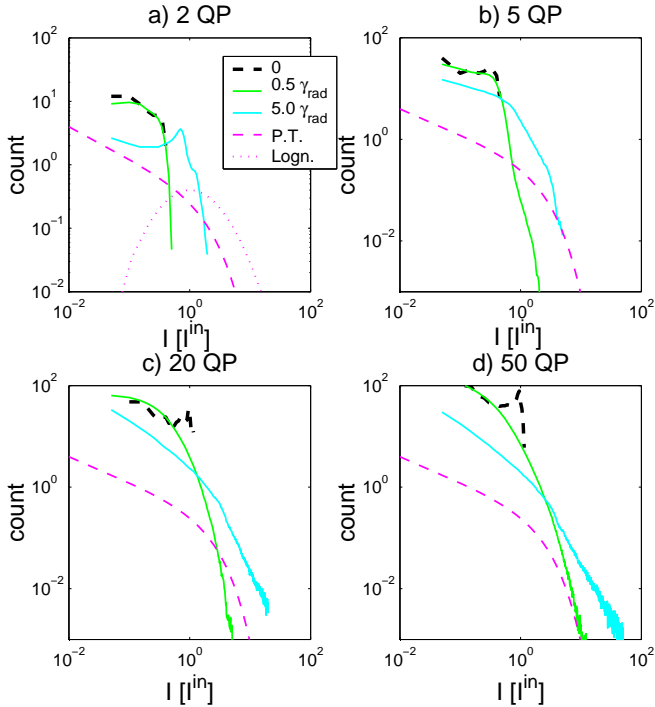


Abbildung 3.10: Intensitätsstatistik bei Anregung bei  $\omega_0 - \gamma_{rad}$ . Dargestellt sind die Ergebnisse für das geordnete (schwarz gestrichelt) und zwei verschieden stark energetisch ungeordnete Systeme (grün und cyan) sowie zum Vergleich die Porter-Thomas-Verteilung (magenta gestrichelt) und die Lognormal-Verteilung (magenta punktiert).

aus dem Übergangsbereich Lokalisierung-Delokalisierung vorliegen.

Abbildung 3.12 zeigt die gleichen Daten wie Abbildung 3.10, aber in halblogarithmischer Darstellung. Hier ist zu erkennen,

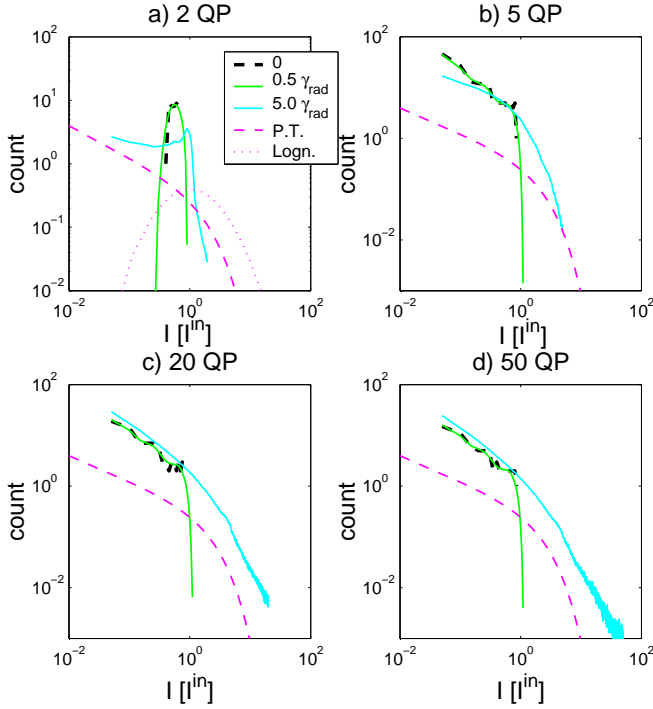


Abbildung 3.11: Intensitätsstatistik bei Anregung bei  $\omega_0 + 2\gamma_{\text{rad}}$ . Dargestellt sind die Ergebnisse in der gleichen Form wie in Abbildung 3.10.

dass beide Ergebnisse für energetische Unordnung sehr häufiges Auftreten kleiner Intensitäten zeigen, wobei stärkere Unordnung einen deutlichen Ausläufer für große Intensitäten verursacht. Allerdings erfüllt die Wellenfunktion für schwache Unordnung (grüne Linie in den Abbildungen 3.9, 3.10 und 3.12) im Gegensatz zum Ergebnis für stärkere Unordnung (cyane Linie) nicht das Kriterium verschwindender Transmission, wie in

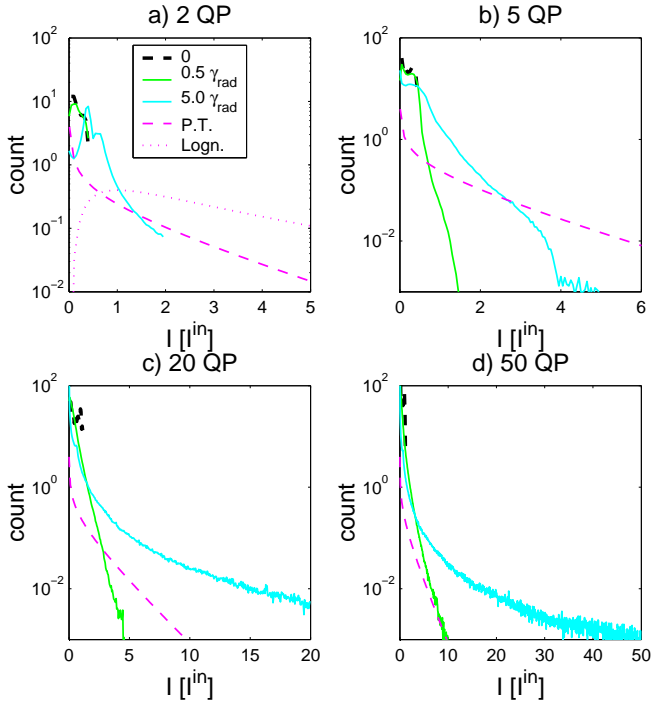


Abbildung 3.12: Intensitätsstatistik bei Anregung bei  $\omega_0 - \gamma_{rad}$ . Dargestellt sind die gleichen Ergebnisse wie in Abbildung 3.10, hier jedoch in halblogarithmischer Auftragung.

Abbildung 3.9 zu sehen ist. Damit kann die Klassifikation der Wellenfunktionen nicht allein auf der Grundlage der Statistik für Wellenfunktionsintensitäten durchgeführt werden.

Für lokalisierte Wellenfunktionen existiert aber ohnehin kein scharfes Kriterium innerhalb dieser Methode. Die Ursache für die delokalisierten Wellenfunktionen kann darin liegen, dass die zu Grunde liegenden Theorien (Random Matrix Theory [14],

Supersymmetrie-Techniken und Nichtlineares  $\sigma$ -Modell [53–55]) hier nicht ohne weiteres anwendbar sind. Schon in den ersten experimentellen Arbeiten mit Mikrowellensystemen wurden Abweichungen vom Universalverhalten nach der Random Matrix Theory beobachtet, so dass z.B. Korrekturen zur Porter-Thomas-Verteilung der Intensitäten chaotischer Wellenfunktionen berücksichtigt werden mussten, um zur Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment zu gelangen [49]. Derartige Korrekturen können auch für die Quantenfilm-Ensembles notwendig sein, jedoch sind diese Korrekturen, die prinzipiell mit der Supersymmetrie-Technik bestimmt werden können, abhängig von Systemeigenschaften wie Dimensionalität und genauer Geometrie.

## 4 Coulomb-Wechselwirkung in photonischen Kristallen

Für die Untersuchungen in diesem Teil der Arbeit soll ein System aus einem zweidimensionalen photonischen Kristall und einem intakten idealen Halbleiter-Quantenfilm zu Grunde gelegt werden, wie es in Abbildung 4.1 skizziert ist. Der Quantenfilm und

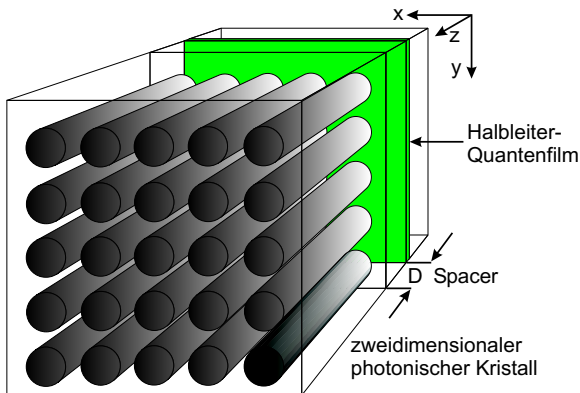


Abbildung 4.1: Ausschnitt aus dem Modellsystem mit zweidimensionalem photonischen Kristall und Halbleiter-Quantenfilm. Die Struktur ist in  $x$ - und in  $y$ -Richtung periodisch fortgesetzt.

das umgebende Halbleitermaterial sollen die gleiche Dielektrizitätskonstante (DK)  $\epsilon_1$  haben, während die Zylinder mit Luft

---

( $\varepsilon_2 = 1$ ) gefüllt sein sollen. Die Zylinder werden als unendlich in positiver  $z$ -Richtung ausgedehnt angenommen. Der untere Rand der Zylinder hat jeweils den Abstand  $D$  zum Quantenfilm, der idealisiert ohne Ausdehnung in  $z$ -Richtung und mit unendlicher Ausdehnung in  $x$ - und  $y$ -Richtung beschrieben wird.

Die Maxwell-Gleichungen für die elektromagnetischen Felder in einem dielektrisch strukturierten System sind der Startpunkt der Betrachtungen. Sie lauten im CGS-System:

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = 4\pi\rho(\vec{r}, t) \quad (4.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (4.2)$$

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \partial_t \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (4.3)$$

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t) \quad (4.4)$$

Die Materialien sollen lineare Medien sein, so dass für das elektrische Feld  $\vec{E}$ , die Polarisation  $\vec{P}$  und die dielektrische Verschiebung  $\vec{D}$  gilt:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}, t) + 4\pi\vec{P}(\vec{r}, t) \quad (4.5)$$

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}, t) \quad (4.6)$$

Entsprechend lauten die Materialgleichungen für die magnetische Induktion  $\vec{B}$ , die Magnetisierung  $\vec{M}$  und das Magnetfeld  $\vec{H}$

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{B}(\vec{r}, t) - 4\pi\vec{M}(\vec{r}, t) \quad (4.7)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \mu\vec{H}(\vec{r}, t) \quad (4.8)$$

wobei die magnetische Permeabilität  $\mu$  als konstant behandelt wird.

Die dielektrische Funktion  $\varepsilon(\vec{r})$  ist in photonischen Kristallen innerhalb homogener Gebiete  $D_i$  stückweise konstant:

$$\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon_i \quad \text{für } \vec{r} \in D_i \quad (4.9)$$

Die vier Maxwell-Gleichungen für die Felder können durch die Einführung der elektromagnetischen Potentiale  $\phi$  und  $\vec{A}$  auf zwei Gleichungen für die Potentiale reduziert werden, siehe dazu den Anhang B. Von besonderer Wichtigkeit ist im hier behandelten Fall dielektrisch strukturierter Systeme die generalisierte Coulomb-Eichung (B.5), die daher auch hier aufgeführt werden soll:

$$\nabla \cdot [\epsilon(\vec{r}) \vec{A}(\vec{r}, t)] = 0 \quad (4.10)$$

Das generalisierte Coulomb-Potential  $V_C$  ist dann die Lösung der Poisson-Gleichung (B.6) mit einer  $\delta$ -Inhomogenität:

$$-\nabla \cdot [\epsilon(\vec{r}) \nabla V_C(\vec{r}, \vec{r}')] = 4\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.11)$$

Mit dem generalisierten Coulomb-Potential  $V_C$  erhält man als Lösung der Poisson-Gleichung (B.6)

$$\phi(\vec{r}, t) = \int d^3 r' V_C(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}', t) \quad (4.12)$$

Für das generalisierte Coulomb-Potential  $V_C$  gilt die Identität

$$V_C(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r'' [\nabla'' \cdot \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}'|}] \cdot \vec{E}_l(\vec{r}'', \vec{r}') \quad (4.13)$$

die mit partieller Integration geprüft werden kann. Der Zusatz  $l$  in  $\vec{E}_l$  bedeutet, dass es sich bei diesem Feld-Anteil um denjenigen Anteil handelt, der mit dem skalaren Potential verknüpft ist, d.h.  $\vec{E}_l = -\nabla V_C$ . Weitere longitudinale Anteile sind mit dem Vektorfeld verbunden, da hier wegen der Inhomogenität des Systems nicht die Coulomb-Eichung, sondern die generalisierte Coulomb-Eichung verwendet wird.

Diese Gleichung kann für beliebige Geometrien nur numerisch unter Berücksichtigung der Randbedingungen für das elektrische Feld und die dielektrische Verschiebung an den Grenzflächen  $\partial D_{ij}$  zwischen den Volumina  $D_i$  und  $D_j$  gelöst werden:

$$\vec{n}_i \cdot \vec{D}_i(\vec{r}, \vec{r}') = \vec{n}_i \cdot \vec{D}_j(\vec{r}, \vec{r}') \quad \text{für } \vec{r} \in \partial D_{ij} \quad (4.14)$$

$$\vec{n}_i \times \vec{E}_i(\vec{r}, \vec{r}') = \vec{n}_i \times \vec{E}_j(\vec{r}, \vec{r}') \quad \text{für } \vec{r} \in \partial D_{ij} \quad (4.15)$$



Der Normalenvektor  $\vec{n}_i$  zeigt dabei aus dem Volumen  $D_i$  in das Volumen  $D_j$ .

Die rechte Seite der Gleichung (4.13) kann mit partieller Integration ausgewertet werden, wobei ich mich im folgenden auf zwei Raumbereiche beschränke:

$$\begin{aligned} V_C(\vec{r}, \vec{r}') = & -\frac{1}{4\pi} \int_{D_1+D_2} d^3 r'' \nabla'' \cdot \left( \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} \vec{E}_l(\vec{r}'', \vec{r}') \right) \\ & + \frac{1}{4\pi} \int_{D_1+D_2} d^3 r'' \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} \nabla'' \cdot \vec{E}_l(\vec{r}'', \vec{r}') \end{aligned} \quad (4.16)$$

Dabei bedeutet  $\int_{D_1+D_2}$  Integration über beide Volumina  $D_1$  und  $D_2$ . Jetzt kann der erste Summand auf der rechten Seite mit dem Satz von Gauß (A.4) in zwei Oberflächenintegrale über den Rand  $\partial D_1$  von  $D_1$  sowie über den Rand  $\partial D_2$  von  $D_2$  verwandelt werden. Für den zweiten Term kann die Materialgleichung (4.6) verwendet werden:

$$\begin{aligned} V_C(\vec{r}, \vec{r}') = & -\frac{1}{4\pi} \int_{\partial D_1} d^2 r'' \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} \vec{n}_1(\vec{r}'') \cdot \vec{E}_l(\vec{r}'', \vec{r}') \\ & - \frac{1}{4\pi} \int_{\partial D_2} d^2 r'' \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} \vec{n}_2(\vec{r}'') \cdot \vec{E}_l(\vec{r}'', \vec{r}') \\ & + \frac{1}{4\pi} \int_{D_1+D_2} d^3 r'' \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} \nabla'' \cdot (\vec{D}_l(\vec{r}'', \vec{r}') - 4\pi \vec{P}_l(\vec{r}'', \vec{r}')) \end{aligned} \quad (4.17)$$

Da die Gebiete  $D_1$  und  $D_2$  eine gemeinsame Grenzfläche  $\partial D_{12}$  haben sollen, gilt:

$$\vec{n}_1(\vec{r}) = -\vec{n}_2(\vec{r}) \quad (4.18)$$

und es folgt:

$$\begin{aligned} V_C(\vec{r}, \vec{r}') = & -\frac{1}{4\pi} \int_{\partial D_{12}} d^2 r'' \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} \vec{n}_1(\vec{r}'') \cdot (\vec{E}_{l,1}(\vec{r}'', \vec{r}') - \vec{E}_{l,2}(\vec{r}'', \vec{r}')) \\ & + \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} - \int_{D_1+D_2} d^3 r'' \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} \nabla'' \cdot \vec{P}_l(\vec{r}'', \vec{r}') \end{aligned} \quad (4.19)$$

wobei im letzten Term zusätzlich die Poisson-Gleichung mit  $\delta$ -Inhomogenität (4.11) sowie (B.4) und (B.5) eingesetzt wurde.

Damit besteht das generalisierte Coulomb-Potential aus drei Teilen: dem Potential einer Punktladung (Term 2), dem Potential der induzierten Oberflächenpolarisation (Term 1) und dem Potential der induzierten Volumenpolarisation (Term 3). Der dritte Anteil bedeutet eine Abschirmung der Punktquelle mit der dielektrischen Konstante des Volumens, in dem sie sich befindet, was gezeigt werden kann, indem das Volumenintegral in zwei Integrale zerlegt wird, in deren jeweiligem Integrationsgebiet  $D_i$  die DK  $\epsilon_i$  konstant ist. Dann können  $\vec{P}_{l,i} = -\frac{\epsilon_i-1}{4\pi}\nabla V_C$  und (4.11) in beiden Integralen verwendet werden, wobei nur das einen Beitrag liefert, in dessen Integrationsgebiet der Ort  $\vec{r}'$  der Quelle liegt.

Aus der Stetigkeitsbedingung (4.14) für die Normalkomponente folgt

$$\vec{n}_1(\vec{r})\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\cdot\vec{E}_1(\vec{r},\vec{r}')=\vec{n}_1(\vec{r})\cdot\vec{E}_2(\vec{r},\vec{r}') \quad (4.20)$$

Mit diesen Überlegungen und (4.6) nimmt  $V_C$  die folgende Form an, wobei der Ort der Quelle ab sofort im Gebiet  $D_1$  liegen soll und mit  $\vec{r}_1$  statt  $\vec{r}'$  bezeichnet werden soll:

$$\begin{aligned} V_C(\vec{r}) &= \frac{1}{\epsilon_1} \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}_1|} \\ &+ \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1\right) \int_{\partial D_{12}} d^2r' \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \vec{n}(\vec{r}') \cdot \vec{D}_l(\vec{r}', \vec{r}_1) \\ &= V_0(\vec{r}) + \delta V(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Das generalisierte Coulomb-Potential für eine Testladung mit Einheitsladung 1 bei  $\vec{r}$  kann also bestimmt werden, wenn die durch eine Punktquelle mit Einheitsladung 1 bei  $\vec{r}_1$  induzierte Oberflächenpolarisation auf der Grenzfläche  $\partial D_{12}$  bekannt ist. Um  $\vec{n}_1(\vec{r}') \cdot \vec{D}_l(\vec{r}', \vec{r}_1)$  zu bestimmen, kann aus (4.21) mit Hilfe von (B.4), der generalisierten Coulomb-Eichung (B.5) und durch Multiplikation mit dem Normalenvektor eine Integralgleichung für

die Normalkomponente  $D_n(\vec{r})$  von  $\vec{D}_l(\vec{r}, \vec{r}_1)$  abgeleitet werden:

$$\begin{aligned} D_n(\vec{r}) &= \vec{n}(\vec{r}) \cdot \vec{D}_l(\vec{r}, \vec{r}_1) = \vec{n}(\vec{r}) \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|^3} \\ &+ \frac{1}{4\pi} \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \int_{\partial D_{12}} d^2 r' \vec{n}(\vec{r}) \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_n(\vec{r}') \\ &= D_n^0(\vec{r}) + \delta D_n(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.22)$$

Mit dieser Gleichung kann  $D_n(\vec{r})$  bestimmt werden, um danach das Potential mit Berücksichtigung der Grenzflächen mittels (4.21) zu berechnen. Die Gleichung (4.22) ist eine lineare Integralgleichung für  $D_n(\vec{r})$ , die für die meisten Geometrien nur numerisch lösbar ist.

Die Verallgemeinerung der Gleichungen (4.21) und (4.22) auf beliebig viele Grenzflächen kann analog zum hier angegebenen Verfahren abgeleitet werden. Sie enthält an Stelle eines Oberflächenintegrals die Summe der Oberflächenintegrale über alle existierenden Grenzflächen:

$$\begin{aligned} V_C(\vec{r}) &= \frac{1}{\varepsilon(\vec{r}_1)} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} \\ &+ \frac{1}{4\pi} \sum_{i,j:i>j} \frac{1}{\varepsilon_i} \left( \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_j} - 1 \right) \int_{\partial D_{ij}} d^2 r' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \vec{n}(\vec{r}') \cdot \vec{D}_l(\vec{r}', \vec{r}_1) \\ &= V_0(\vec{r}) + \delta V(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.23)$$

und

$$\begin{aligned} D_n(\vec{r}) &= \vec{n}(\vec{r}) \cdot \vec{D}_l(\vec{r}, \vec{r}_1) = \vec{n}(\vec{r}) \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|^3} \\ &+ \frac{1}{4\pi} \sum_{i,j:i>j} \left( \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_j} - 1 \right) \int_{\partial D_{ij}} d^2 r' \vec{n}(\vec{r}) \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_n(\vec{r}') \\ &= D_n^0(\vec{r}) + \delta D_n(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.24)$$

Für einen zweidimensionalen photonischen Kristall haben die Dielektrizitätskonstanten  $\varepsilon_i$  sowie die Grenzflächen  $\partial D_{ij}$  mit ih-

ren Normalenvektoren  $\vec{n}$  dieselbe Periodizität wie der photonische Kristall. Daher folgt, dass auch das generalisierte Coulomb-Potential  $V_C$  gitterperiodisch ist.

# 5 Numerische Methoden für lineare Integralgleichungen

## 5.1 Lineare Integralgleichungen

Eine Gleichung der Form

$$h(x)f(x) = g(x) + \lambda \int_{a(x)}^{b(x)} K(x,y)f(y)dy \quad (5.1)$$

ist eine lineare Integralgleichung [56]. Darin ist die Funktion  $f(x)$  zu bestimmen,  $K(x,y)$  ist der Kern und  $g(x)$  ist die Inhomogenität der Integralgleichung.

Schreibt man die hier zu lösende Gleichung (4.22) formal eindimensional, so erhält man

$$f(x) = g(x) + \lambda \int_a^b K(x,y)f(y)dy \quad (5.2)$$

d.h., die Integrationsgrenzen hängen nicht von der unabhängigen Variable  $x$  ab und es ist  $h(x) = 1$ . Daher ist (4.22) eine Fredholmsche Integralgleichung 2. Art.

## 5.2 Numerische Verfahren

Zur Lösung Fredholmscher Integralgleichungen 2. Art existieren verschiedene Methoden [56]:

- Spezielle Methoden für Integralgleichungen mit Produktkern
- Methode der sukzessiven Approximation
- Fredholmsche Lösungsmethode
- Integralapproximation
- Kernapproximation
- Kollokationsmethode

Durch den Kern der hier vorliegenden Gleichung (4.22) sind einige der erwähnten Verfahren nicht geeignet, die Lösung der Gleichung zu finden. Für die einzelnen Methoden findet man:

- Die Kerne hängen von der genauen Geometrie der Grenzfläche ab und sind daher im Allgemeinen nicht in Faktoren zerlegbar, von denen jeder einzelne entweder nur von  $\vec{r}$  oder nur von  $\vec{r}'$  abhängt.
- Die sukzessive Approximation ist ein iteratives Verfahren, bei dem das Ergebnis  $f_n(x)$  des Iterationsschritts  $n$  wieder im Integral der Integralgleichung eingesetzt wird, um das Ergebnis für den Schritt  $n + 1$  zu erhalten:

$$f_n(x) = g(x) + \lambda \int_a^b K(x, y) f_{n-1}(y) dy \quad (5.3)$$

mit

$$f_0(x) = g(x) \quad (5.4)$$

Daher ist im ersten Schritt:

$$f_1(x) = g(x) + \lambda \int_a^b K(x, y) g(y) dy \quad (5.5)$$

und im zweiten:

$$\begin{aligned}
 f_2(x) &= g(x) + \lambda \int_a^b K(x, z) f_1(z) dz \\
 &= g(x) + \lambda \int_a^b K(x, z) g(z) dz \\
 &\quad + \lambda^2 \int_a^b \int_a^b K(x, z) K(z, y) g(y) dy dz
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Wird diese Iteration fortgeführt, so erhält man die Neumannsche Reihe, für deren Konvergenz Kriterien formuliert werden können, z.B.:

$$|\lambda| < \frac{1}{\sqrt{\int_a^b \int_a^b |K(x, y)|^2 dx dy}} \tag{5.7}$$

Das Integral im Nenner muss für unseren Fall wegen der Singularität nicht existieren, so dass dieses Kriterium nicht erfüllt sein muss. Dann kann die Integralgleichung zwar immer noch eine Lösung besitzen, diese lässt sich aber nicht durch die Neumannsche Reihe approximieren.

- Die Fredholmsche Methode und die Integralapproximation haben gemeinsam, dass hier das Integral durch eine endliche Summe genähert wird:

$$\int f(x) dx \approx \sum_{i=0}^N w_i f(x_i) \tag{5.8}$$

Die Unterschiede bestehen in verschiedenen Quadraturformeln zur Approximation des Integrals durch eine Summe. Die Verfahren führen auf eine Matrixgleichung, wobei der Rang der Matrix  $N$  ist. Wenn also eine Quadraturformel gefunden werden kann, so dass bei einer geforderten Genauigkeit die Zahl  $N$  relativ klein gewählt werden kann, so ist dieses Verfahren durchaus zur Implementierung auf Computern geeignet.

- Für die Kernapproximation wird der Kern  $K(x,y)$  durch einen näherungsweise gleichen Kern  $\bar{K}(x,y)$  ersetzt, der eine einfache Lösung der Gleichung ermöglichen soll. Vorgeschlagene Näherungen sind z.B. die Tensorprodukt-Approximation:

$$K(x,y) \approx \bar{K}(x,y) = \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^n d_{jk} \alpha_j(x) \beta_k(y) \quad (5.9)$$

mit linear unabhängigen Funktionen  $\alpha_0(x) \cdots \alpha_n(x)$  und  $\beta_0(y) \cdots \beta_n(y)$  sowie stückweise Spline-Ansätze. Wie sich aber später zeigen wird, lassen sich die in unserem Problem vorliegenden Kerne in  $\delta$ -artige Terme und Korrekturen dazu zerlegen, so dass eine Näherung den tatsächlichen Kern kaum zufriedenstellend approximieren kann, zumal der  $\delta$ -artige Term eine physikalische Bedeutung besitzt und der Kern daher möglichst exakt behandelt werden soll.

- Die Kollokationsmethode verlangt die Entwicklung der unbekannten Lösung in  $N$  linear unabhängige Funktionen:

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^N a_i f_i(x) = \bar{f}(x) \quad (5.10)$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten  $a_i$  so gewählt werden, dass  $\bar{f}(x)$  die Integralgleichung an  $N$  gewählten Orten  $x_0 \dots x_N$  im Integrationsintervall erfüllt. Dann führt auch dieses Verfahren auf eine Matrixgleichung, wobei die Matrix den Rang  $N$  hat. Da die Lösung der Integralgleichung hier aber nur ein Zwischenergebnis zur Bestimmung des eigentlich gesuchten Potentials ist, sollte die Lösung die Integralgleichung überall im Integrationsgebiet möglichst gut erfüllen.

Damit bleibt als geeignetes numerisches Verfahren zur Lösung der Fredholm-Integralgleichung 2. Art (5.2) die Integralapproximationsmethode, die im Fall einer Gaußschen Quadraturformel auch Nyström-Verfahren genannt wird [57].



## 5.3 Numerische Integration

Für die Anwendung des Nyström-Verfahrens muss das Integral in (5.2) durch eine Summe ersetzt werden, wobei bei möglichst geringem Aufwand der numerische Fehler klein sein soll. Ein-dimensionale numerische Integrationsverfahren lassen sich im Wesentlichen aufteilen in einfache Regeln wie die Trapez- oder Simpson-Regel und ihren Varianten höherer Ordnung sowie die Gaußsche Quadratur.

Die einfachen Quadraturformeln lassen sich einfach und anschaulich ableiten, weil das Integral über eine Funktion  $f(x)$  zwischen  $a$  und  $b$  als Fläche unter der Kurve von  $f(x)$  interpretiert werden kann. Diese Fläche wird näherungsweise in jeweils gleich breite Rechtecke oder Trapeze zerlegt, um anschließend deren einfach berechenbare Flächen zu addieren, was die Gesamtfläche ergibt und somit auch den Wert des Integrals. Das Problem dieser Verfahren ist, dass die Funktion  $f(x)$  an sehr vielen Stellen  $x_i$  mit  $a = x_1 \leq x_i \leq x_N = b$  ausgewertet werden muss, um den numerischen Fehler klein zu halten. Eine der nützlicheren Regeln dieser Art ist die sogenannte Extended Open Mid-Point Formula [57]:

$$\int_a^b f(x)dx = h(f(x_{3/2}) + f(x_{5/2}) + \cdots + f(x_{N-3/2}) + f(x_{N-1/2})) \quad (5.11)$$

Dabei ist  $h = (b - a)/(N - 1)$  die Breite der Intervalle, in die  $(a, b)$  eingeteilt wird, so dass  $x_i = x_1 + (i - 1)h$  mit  $i = 1 \cdots N$  ist. In dieser Regel wird die zu integrierende Funktion aber nicht bei  $x_i$  ausgewertet, sondern immer genau zwischen zwei Punkten  $x_i$  und  $x_{i+1}$ . Dadurch hat (5.11) die Vorteile, dass die Gewichte  $w_i$  aus (5.8) alle gleich sind und das Verfahren daher sehr einfach ist, sowie, dass  $f(x)$  nicht an den Endpunkten des Integrationsbereichs  $x_1$  und  $x_N$  ausgewertet werden muss.

Der Grund für den hohen Aufwand mit den einfachen Quadraturformeln, um eine bestimmte Genauigkeit zu erreichen, ist die simple Einteilung des Integrationsbereichs in gleich große

Abschnitte, d.h. die Integrationspunkte  $x_i$ , an denen der Integrand ausgewertet werden muss, sind äquidistant im Integrationsintervall angeordnet. Bei den Gaußschen Quadraturverfahren wird die Lage der Integrationspunkte speziell gewählt, so dass eine vorgegebene Genauigkeit mit weniger Aufwand erreicht werden kann, zumindest wenn der Integrand ausreichend "gutartig" ist. Der andere Vorteil der Gauß-Verfahren, dass nämlich bestimmte integrable Singularitäten aus dem Integral entfernt werden können, kommt hier nicht zum Tragen, denn der Integrand ist in einer linearen Integralgleichung nicht bekannt. Daher soll auf diesen Aspekt nicht weiter eingegangen werden, und ich beschränke mich auf die am häufigsten angewandte Form der Gauß-Quadratur, die Gauß-Legendre-Integration. Für ein Verfahren mit  $N$  Integrationspunkten sind dabei die Integrationspunkte  $x_i$  durch die  $N$  Nullstellen des Legendre-Polynoms  $P_N(x)$  gegeben, die jeweils von geschätzten Startwerten aus durch die Newton-Methode zur Nullstellensuche bestimmt werden können. Die Gewichte  $w_i$  werden mittels

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2) \left( \frac{d}{dx} P_N(x) \right)^2} \quad (5.12)$$

berechnet [56, 57].

Bislang wurde nur eindimensionale Integration besprochen, für die Integralgleichung (4.22) wird aber zweidimensionale numerische Integration benötigt. Da die Integrationsgebiete unproblematisch sind, besteht der Ansatz hier in wiederholter eindimensionaler Integration:

$$\int_{\partial D} f(x, y) dx dy = \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy f(x, y) \quad (5.13)$$

und damit

$$\int_{\partial D} f(x, y) dx dy \approx \sum_i \sum_j w_i v_j f(x_i, y_j) \quad (5.14)$$

wobei die Gewichte  $w_i$  und  $v_j$  sowie die Abszissen  $x_i$  und  $y_j$  jeweils mittels Gauß-Legendre-Verfahren bestimmt werden. Wenn

die Integrationsgebiete nicht so einfach beschaffen sein würden, müsste zu komplizierteren Methoden für mehrdimensionale Integration gegriffen werden, z.B. einer Monte Carlo-Methode.

Ein weiteres Problem für numerische Integrationsverfahren sind nicht-endliche Integrationsgrenzen. Die Lösung hierfür ist eine Transformation der Integrationsvariablen, damit aus dem unendlichen Integrationsbereich ein endlicher wird, z.B.

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{1/b}^{1/a} \frac{1}{t^2} f\left(\frac{1}{t}\right) dt \quad (5.15)$$

für Integranden  $f(x)$ , die schneller als  $1/x^2$  für  $x \rightarrow \infty$  gegen Null gehen. Dabei kann entweder  $b \rightarrow \infty$  und  $a > 0$  oder  $b < 0$  und  $a \rightarrow -\infty$  sein. Ist keine der beiden Bedingungen erfüllt, dann muss der Integrationsbereich geteilt werden, bis alle Teilbereiche endliche Grenzen haben oder die angegebenen Bedingungen für die Integrationsgrenzen erfüllt sind [57].

## 5.4 Singuläre Kerne

Mit einer der im letzten Abschnitt besprochenen Quadraturformeln nimmt die lineare eindimensionale Integralgleichung (5.2) die Form

$$f(x) = g(x) + \lambda \sum_{j=1}^N w_j K(x, y_j) f(y_j) \quad (5.16)$$

an, die nun für  $x = x_i$  ausgewertet wird:

$$f(x_i) = g(x_i) + \lambda \sum_{j=1}^N w_j K(x_i, y_j) f(y_j) \quad (5.17)$$

wobei jetzt sowohl die  $x_i$  als auch die  $y_j$  die Integrationspunkte sind. Das bedeutet, dass der Kern  $K(x, y)$  auch für  $x = y$  ausgewertet werden muss, was im vorliegenden Fall (4.22) nicht möglich ist, da der Kern dieser Integralgleichung dort singulär ist.

Um dieses Problem zu beheben, kann die Singularität abgezogen werden:

$$\begin{aligned}
 \int_a^b dy K(x, y) f(y) &= \int_a^b dy K(x, y) [f(y) - f(x)] + \\
 &\quad \int_a^b dy K(x, y) f(x) \\
 &= \int_a^b dy K(x, y) [f(y) - f(x)] + I(x)f(x)
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

wobei

$$I(x) = \int_a^b dy K(x, y) \tag{5.19}$$

ist und gegebenenfalls numerisch berechnet werden muss. Damit erhält man:

$$f(x_i) = \lambda \sum_{j=1, j \neq i}^N w_j K(x_i, y_j) [f(y_j) - f(x_i)] + \lambda I(x_i) f(x_i) + g(x_i) \tag{5.20}$$

und mit

$$J(x_j) = \sum_{k, k \neq j}^N w_k K(x_j, x_k) \tag{5.21}$$

als Matrixgleichung geschrieben:

$$\sum_{j=1}^N [\delta_{ij} (1 + \lambda J(x_j) - \lambda I(x_j)) - (1 - \delta_{ij}) \lambda w_j K(x_i, x_j)] f(x_j) = g(x_i) \tag{5.22}$$

für  $1 \leq i \leq N$ . Dabei soll die Schreibweise für den Nicht-Diagonal-Term andeuten, dass auf der Diagonalen der Kern nicht ausgewertet werden soll.

Solche Matrixgleichungen können numerisch sehr effizient gelöst werden, vorzugsweise unter Verwendung einer speziell auf die verwendete Rechnerarchitektur angepassten Bibliothek, z.B. die Compaq Extended Math Library für Workstations mit

Alpha-Prozessor, die Intel Math Kernel Library für PCs mit Intel-Prozessoren oder die IBM Engineering Scientific Subroutine Library für IBM-Workstations mit Power-Prozessor.

## 6 Durchführung der Methode für photonische Kristalle

Das Ziel der Untersuchung ist die theoretische Beschreibung der Modifikationen der Wechselwirkung zwischen Elektronen und Löchern in einem Halbleiter in unmittelbarer Umgebung eines photonischen Kristalls.

Wie im vorangegangenen Abschnitt dargestellt, mündet die Behandlung der Coulomb-Wechselwirkung bei Anwesenheit von Grenzflächen zwischen verschiedenen Dielektrika in eine Matrix-Gleichung, die numerisch gelöst werden muss. Der Aufwand, der mit entsprechenden Lösungsverfahren betrieben werden kann, ist dabei durch den verfügbaren Computer-Speicher und nicht durch die Rechenzeit begrenzt, d.h. die die Größe der Grenzfläche ist im numerischen Verfahren begrenzt. Daher soll zunächst nur ein "Baustein" eines zweidimensionalen photonischen Kristalls modelliert werden, ein mit Luft gefüllter Zylinder in einem dielektrischen Material. Als Vorstufe dazu wiederum sollen einfache Geometrien untersucht werden, für die es auch analytische Lösungen gibt, um die Korrektheit der abgeleiteten Gleichungen und die Tauglichkeit der numerischen Methode zu prüfen.

Für die numerische Behandlung von Coulomb-gebundenen Elektron-Loch-Paaren in Halbleitern (siehe Abschnitt 7) bietet sich die Verwendung der sogenannten exzitonischen Einheiten an, die passende Skalen für Längen, Energien und Zeiten bereitstellen. Außerdem vermeidet die Nutzung dieser Einheiten, dass

in Computerprogrammen sehr kleine oder sehr große Zahlen entstehen, die Rechenungenauigkeiten verursachen. Diese Einheiten sollen bereits jetzt eingeführt werden, damit alle folgenden Ergebnisse in gleichen Einheiten präsentiert werden können und damit untereinander vergleichbar sind.

Die exzitonischen Einheiten sind definiert durch:

$$\begin{aligned} e^2 &= \varepsilon_1 \\ \mu &= 1 \\ \hbar &= 1 \end{aligned} \tag{6.1}$$

wobei  $e$  die Elementarladung,  $\varepsilon_1$  die DK des umgebenden Halbleitermaterials und  $\mu$  ab sofort die reduzierte Masse eines gebunden Elektron-Loch-Paares sind. Mit Materialparametern für GaAs (insbesondere  $\varepsilon_1 = 13.1$ ) bedeuten diese Definitionen, dass Längen in exzitonischen 3D-Bohr-Radien  $a_B = 130\text{\AA}$  gemessen werden, Energien in zweifachen exzitonischen 3D-Bindungsenergien  $2E_B = 8.4\text{meV}$  und Zeiten in  $\hbar/(2E_B) = 79\text{fs}$ . Um den Faktor 2 für Energien in den folgenden Abbildungen zu vermeiden, wurden alle numerisch berechneten Energien und auch Coulomb-Potentiale für die Abbildungen mit 2 multipliziert. Damit ist die Energieskala in allen betroffenen Abbildungen  $E_B$ .

## 6.1 Zwei Halbräume

Die einfachste Geometrie mit zwei dielektrischen Gebieten sind zwei Halbräume, deren dielektrische Konstanten  $\varepsilon_1$  und  $\varepsilon_2$  sind. Befindet sich eine Ladung  $q_1$  im Abstand  $D$  vor der Grenzfläche, die bei  $z = 0$  liegen soll, so können die Randbedingungen (4.14), (4.15) durch eine imaginäre Punktladung  $q'_1$  auf der anderen Seite der Grenzfläche ersetzt werden (siehe Abbildung 6.1), so dass dem Potential der realen Ladung zusammen mit den Randbedingungen das Potential der beiden Punktladungen überall im Halbraum  $z < 0$  entspricht. Daher nennt man dieses Verfahren

auch Spiegelladungs- oder Bildladungsmethode [45,58]. Das Ver-

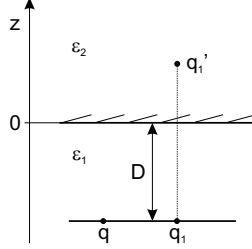


Abbildung 6.1: Spiegelladungsmethode für eine Ladung  $q_1$  im Abstand  $D$  vor einer Grenzfläche zwischen zwei dielektrischen Halbräumen mit den DK  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$ . Die Ladung  $q$  dient zum Testen des Potentials der Quelle  $q_1$ .

fahren ergibt für diese Geometrie folgende additive Korrektur  $\delta V$  zum gewöhnlichen Coulomb-Potential  $V_0$ :

$$\delta V(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_1} \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{1}{\sqrt{(\vec{r} - \vec{r}_1)^2 + 4D^2}} \quad (6.2)$$

wobei wie bisher  $\vec{r}$  der Ort (hier  $(x, y, -D)$ ) der Testeinheitsladung  $q$  und  $\vec{r}_1$  der Ort (hier  $(x_1, y_1, -D)$ ) der Quelle  $q_1$  mit Einheitsladung ist. Dieses Resultat dient im Folgenden zum Vergleich mit den numerisch gewonnenen Ergebnissen.

In der Integralgleichung (4.22) für die Normalkomponente der dielektrischen Verschiebung sind mit dieser Geometrie die Normalenvektoren  $\vec{n}(\vec{r}) = \vec{e}_z = (0, 0, z)_{cart}$  und  $\vec{n}(\vec{r}') = \vec{e}_{z'} = (0, 0, z')_{cart}$ . Daher vereinfacht sich (4.22) zu:

$$D_z(\vec{r}) = \frac{z - z_1}{\sqrt{|\vec{\rho} - \vec{\rho}_1|^2 + (z - z_1)^2}} + \frac{1}{4\pi} \left( \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dy' \frac{(z - z')}{\sqrt{|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|^2 + (z - z')^2}} D_z(\vec{r}') \Big|_{z'=0} \quad (6.3)$$



Darin ist  $\vec{\rho}$  der zu  $\vec{r} = (x, y, z)$  gehörende zweidimensionale Vektor  $(x, y)$ . Für den Integranden wurde diese Schreibweise gewählt, weil die Integralgleichung auf der Grenzfläche gelöst wird, also  $\vec{r}$  und  $\vec{r}'$  beide auf einer Fläche  $z = 0, z' = 0$  liegen und somit im Integranden eine Singularität entsteht. Man kann zeigen, dass der Kern des Integrals eine  $\delta$ -Funktion ist, d.h. die Funktionenfolge

$$K_\varepsilon(\vec{\rho}, \vec{\rho}') = \frac{\varepsilon}{\sqrt{|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|^2 + \varepsilon^2}^3} \quad (6.4)$$

erfüllt die Bedingungen:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} K_\varepsilon(\vec{\rho}, \vec{\rho}') = 0 \quad \forall \vec{\rho} \neq \vec{\rho}' \quad (6.5)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_S K_\varepsilon(\vec{\rho}, \vec{\rho}') d^2 \rho' = \begin{cases} 1 & \text{falls } \vec{\rho} \in S \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.6)$$

wobei  $\varepsilon$  hier nicht eine Dielektrizitätskonstante, sondern im "mathematischen Sinne" eine infinitesimal kleine reelle Zahl ist. Damit gilt hier:

$$\lim_{z-z' \rightarrow 0^-} \frac{z-z'}{\sqrt{|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|^2 + (z-z')^2}^3} = -2\pi\delta(\vec{\rho} - \vec{\rho}') \quad (6.7)$$

Aus der Integralgleichung wird so eine algebraische Gleichung:

$$D_z(\vec{\rho}, 0) = \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{-z_1}{\sqrt{|\vec{\rho} - \vec{\rho}_1|^2 + z_1^2}^3} \quad (6.8)$$

deren Lösung unmittelbar in (4.21) eingesetzt werden kann.

In Abbildung 6.2 sind Ergebnisse für die Potentialkorrektur  $\delta V$  für verschiedene Abstände  $D$  zwischen der Grenzfläche der beiden Halbräume und der Ebene, in der sich Quell- und Testladung befinden, dargestellt. Um die Vergleichbarkeit dieser Ergebnisse mit späteren Resultaten zu gewährleisten, wurde für die beiden Gebiete die DK von GaAs bzw. von Luft verwendet, wobei

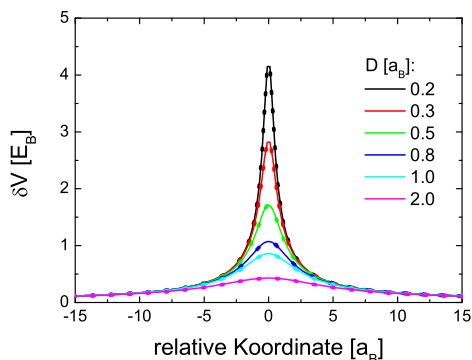


Abbildung 6.2: Korrekturen  $\delta V$  zum Coulomb-Potential zweier Ladungen  $q_1 = e$  und  $q = -e$ , die sich beide im Abstand  $D$  vor einer ebenen Grenzfläche zwischen zwei dielektrischen Halbräumen befinden (siehe auch Abbildung 6.1). Der untere Halbraum, in dem sich die beiden Ladungen befinden, hat die DK  $\varepsilon_1 = 13.1$  und der obere die DK  $\varepsilon_2 = 1$ . Die gepunktete und die durchgezogene Linie einer Farbe sind die numerischen und die analytischen Resultate für einen Abstand  $D$ .

sich die Ladungen im Halbleitermaterial befinden sollen. Auf der  $x$ -Achse ist die relative Koordinate von Test- und Quellladung aufgetragen. Sie entspricht bis auf das Vorzeichen dem Abstand zwischen den beiden Ladungen. Wegen der Zylindersymmetrie des Problems können ohne Einschränkung der Allgemeinheit die Quelle am Ort  $(0, 0, -D)$  und die Testladung am Ort  $(x, 0, -D)$  platziert werden. Dann ist die relative Koordinate für  $x < 0$  der negative Abstand und für  $x \geq 0$  der positive Abstand zwischen den beiden Ladungen. Wenn die betrachtete Geometrie so wie in diesem Fall spiegelsymmetrisch um  $x = 0$  ist, dann hat auch das Coulomb-Potential diese Spiegelsymmetrie. Die Vorzeichen-

konvention für das Coulomb-Potential zwischen zwei Ladungen  $e$  und  $-e$  auf der  $y$ -Achse ist in dieser Arbeit so gewählt, dass positive Potentiale attraktiv wirken. Diese zwei Vereinbarungen gelten sinngemäß auch für die folgenden Abbildungen für weitere Geometrien.

Man erkennt in Abbildung 6.2 eine Verstärkung der anziehenden Wirkung des Coulomb-Potentials. Wie man es erwartet, ist sie besonders ausgeprägt für kleine Abstände  $D$  zwischen den Ladungen und der Grenzfläche und für geringe Abstände zwischen den beiden Ladungen. Die numerisch mittels (4.21) und (6.8) berechneten Ergebnisse (gepunktete Kurven) stimmen dabei perfekt mit den analytischen Resultaten (durchgezogene Kurven) überein, so dass damit die Gleichung (4.21) getestet ist.

## 6.2 Kugel

Eine zweite einfache Geometrie, für die weitreichend analytische Rechnungen möglich sind, ist eine dielektrische Kugel in einem zweiten Dielektrikum. Für diese Geometrie (siehe Abbil-

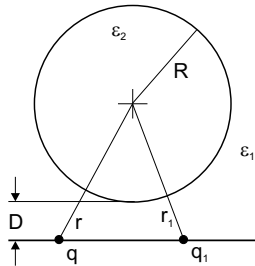


Abbildung 6.3: Eine dielektrischen Kugel mit Radius  $R$  und DK  $\epsilon_2 = 1$  befindet sich in einem weiteren Dielektrikum mit der DK  $\epsilon_1 = 13.1$ , das eine Ebene mit minimalem Abstand  $D$  von der Oberfläche der Kugel enthält. In der Ebene befindet sich sowohl die Punktquelle  $q_1$  als auch die Testladung  $q$ .

dung 6.3) kann die Poisson-Gleichung (B.6) durch Entwicklung des gesuchten Potentials in Legendre-Polynome gelöst werden, wobei unterschieden werden muss, ob sich die Ladung  $q_1$  innerhalb ( $r_1 < R$ ) oder außerhalb ( $r_1 > R$ ) der Kugel befindet. Hier ist nur der zweite Fall von Bedeutung, das Ergebnis ist in diesem Fall:

$$\delta V(\vec{r}, \vec{r}_1) = -\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon_1 R} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_1}{R}\right)^{-l-1} \left(\frac{r}{R}\right)^{-l-1} P_l\left(\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}_1}{rr_1}\right) \frac{l}{1 + l(\varepsilon + 1)} \quad (6.9)$$

wenn auch die Testladung  $q$  bei  $\vec{r}$  außerhalb der Kugel liegt ( $r > R$ ) und die Abkürzung

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \quad (6.10)$$

verwendet wurde [47].

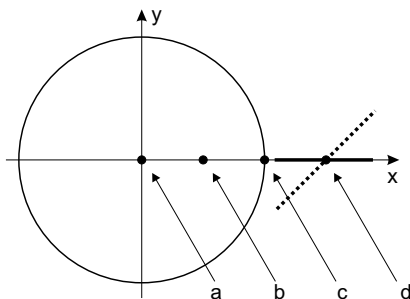


Abbildung 6.4: Aufsicht auf das untersuchte System. Dargestellt sind die Kugel sowie die vier Positionen a, b, c und d für die Quelle. Die Testladung wird für diese vier Orte jeweils entlang der durchgezogenen Linie  $y = 0$  sowie der gepunkteten Linie  $x = y$  bewegt, damit dreidimensionale Abbildungen vermieden werden können und dennoch anisotrope Effekte dargestellt werden können.

Für die numerische Lösung werden angesichts der Symmetrie im Problem Kugelkoordinaten verwendet. Der Kern für die In-

tegralgleichung (4.22) wird im Anhang C.1 abgeleitet. Für die Inhomogenität ergibt sich unter Benutzung von Kugelkoordinaten für  $\vec{r}$  und kartesischer Koordinaten für  $\vec{r}_1$  ein entsprechender Ausdruck.

Mit diesen Vorarbeiten wurde für vier Positionen der Quelle (siehe Abbildung 6.4) die Korrektur  $\delta V$  mittels (4.22) und (4.21) numerisch berechnet und mit dem analytischen Ergebnis (6.9) verglichen. In den beiden Abbildungen 6.5 ( $R = 10$ ) und 6.6 ( $R = 3$ ) sind jeweils zweimal (siehe dazu Abbildung 6.4) drei Kurven dargestellt:

- die numerische Lösung mittels (4.22) und (4.21) (schwarz),
- die analytische Lösung mittels (6.9) (rot) und
- die Lösung, die man erhält, wenn man aus (6.9) analytisch die Normalkomponente der dielektrischen Verschiebung berechnet und mit diesem Zwischenergebnis die Potentialkorrektur mittels (4.21) numerisch berechnet (grün). Dieses Ergebnis dient wiederum der Überprüfung von (4.21) ohne die Verwendung von (4.22).

Die Parameter für die zu Grunde liegenden Rechnungen sind:

- für die numerische Lösung: 39 Integrationspunkte jeweils für  $\varphi$  und  $\vartheta$  in (4.22) und (4.21)
- für die analytische Lösung: Summation der ersten 1000 Summanden der unendlichen Reihe (6.9)
- für die halb-analytische Lösung: die ersten 1000 Summanden aus (6.9) und jeweils 39 Integrationspunkte für  $\varphi$  und  $\vartheta$  in (4.21).

Der Abstand zwischen der Ebene, in der sich sowohl die Quelle als auch die Testladung befinden, ist  $D = 0.3$ .

Es ist zu erkennen, dass die Ergebnisse der drei Methoden für beide Kugelradien  $R$  sehr gut übereinstimmen. Vergleicht man

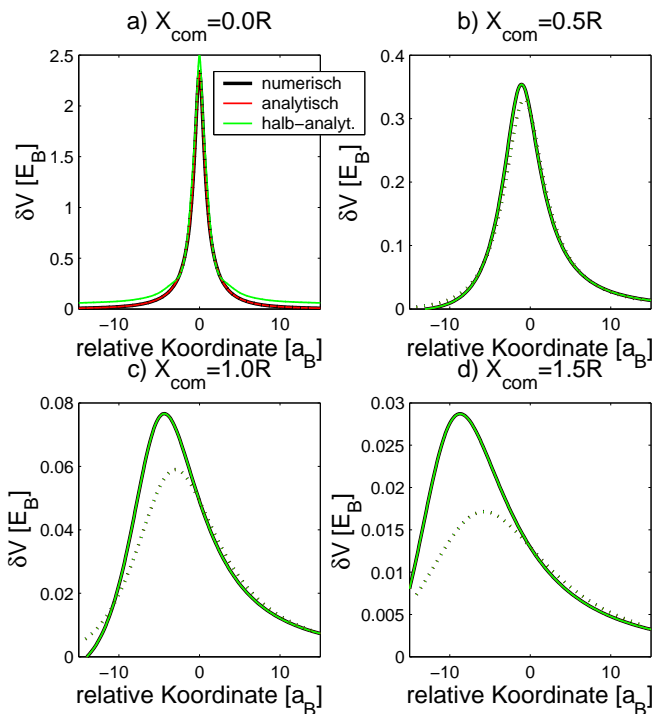


Abbildung 6.5: Die Korrektur  $\delta V$  zum gewöhnlichen Coulomb-Potential  $V_0$  für zwei Ladungen in einer Ebene, vor der sich im Abstand  $D = 0.3$  eine dielektrische Kugel mit dem Radius  $R = 10$  befindet (siehe Abbildung 6.3). Die vier Bildteile a)–d) zeigen Resultate für vier verschiedene Orte der Quelle relativ zur Kugel und zwei verschiedene (durchgezogene und gepunktete Linie) Positionen der beiden Ladungen relativ zueinander (siehe Abbildung 6.4). Die rote Linie ist häufig nicht erkennbar, da die drei Ergebnisse jeweils sehr gut übereinstimmen.

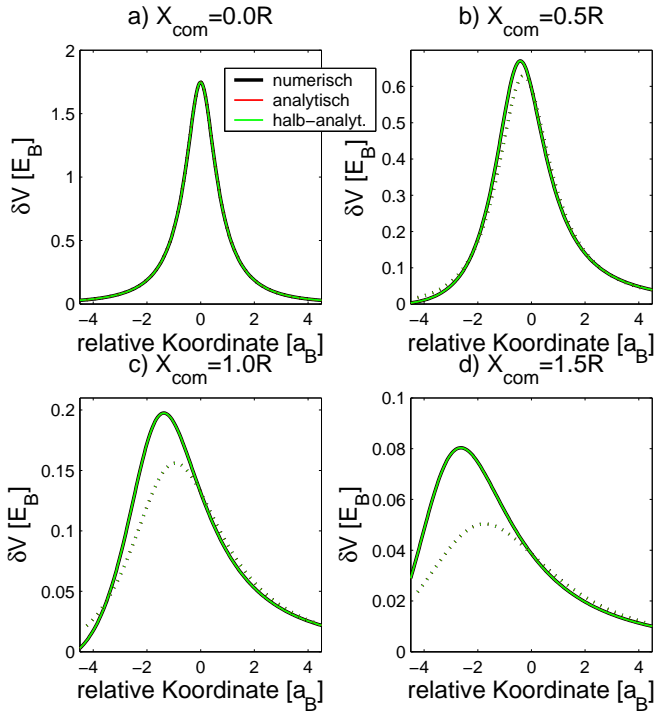


Abbildung 6.6: Ergebnisse für die Korrektur  $\delta V$  für ein ähnliches System wie in Abbildung 6.5, wobei die Kugel jetzt den Radius  $R = 3$  hat.

diese Resultate mit denen für die dielektrischen Halbräume (die rote Kurve in Abbildung 6.2 für  $D = 0.3$ ), so ist festzustellen, dass im Fall a) die Korrektur für die Kugel ähnlich dem Ergebnis für die beiden Halbräume ist. Liegt die Quelle weiter weg von dem Ort, an dem der Abstand zwischen Kugel und Ebene minimal ist, dann nimmt die Korrektur drastisch ab (Fälle b), c) und d)). Die Ursache für die Korrektur  $\delta V$  ist die Erzeugung einer Oberflä-

chenpolarisation auf der Grenzfläche zwischen den beiden Dielektrika durch die Punktquelle und die Wechselwirkung zwischen der induzierten Polarisation und der Testladung. Rücken Quell- und Testladung weg von der Grenzfläche, dann werden beide Ursachen abgeschwächt, da beide eine starke Abhängigkeit vom Abstand zwischen Oberflächenelement und dem Ort der jeweiligen Ladung haben, siehe Gleichungen (4.21) und (4.22).

Weiterhin sind die Resultate für die Fälle b)–d) nicht mehr symmetrisch in der relativen Koordinate, da durch die Anordnung der Quelle relativ zur Kugel die Symmetrie des Systems in diesen Fällen gebrochen ist. Aus dem gleichen Grund weichen auch die Ergebnisse für die beiden Geraden, auf denen die Testladung bewegt wird (siehe Abbildung 6.4), voneinander ab. Damit verliert das Coulomb-Potential für diese Geometrie seine Rotationssymmetrie.

## 6.3 Zylinder mit flachem Boden

Ein geometrisches Grundobjekt, mit dem ein zweidimensionaler photonischer Kristall modelliert werden kann, wenn man viele dieser Grundobjekte periodisch anordnet, ist ein Zylinder mit Radius  $R$ , der sich bei  $z = 0$  beginnend entlang der  $z$ -Achse ausdehnt. Es soll insbesondere kein unendlich entlang der  $z$ -Achse ausgedehnter Zylinder sein, damit der Quantenfilm intakt bleibt und für die Berechnung dessen optischer Eigenschaften eine relativ einfache Beschreibung genutzt werden kann. Der Zylinder soll bei  $z = 0$  durch eine ebene Kreisscheibe abgeschlossen sein.

Damit müssen hier zwei Integrationsgebiete in (4.22) und (4.21) behandelt werden, der Boden und der Mantel des Zylinders. Damit wird (4.21) für eine solche Geometrie zu:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_1 |\vec{r} - \vec{r}_1|} + \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\epsilon_1} \left( \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \left[ \int_A d^2 s' \frac{D_a(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \int_B d^2 s' \frac{D_b(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \quad (6.11)$$



Hier wurde berücksichtigt, dass für das Gebiet  $A$  der Normalenvektor  $\vec{e}_a$  und für  $B$  der Normalenvektor  $\vec{e}_b$  ist. Aus der Integralgleichung (4.22) werden zwei gekoppelte Integralgleichungen:

$$D_a(\vec{r}) = \frac{\vec{e}_a(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|^3} + \frac{1}{4\pi} \left( \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \left[ \int_A d^2s' \frac{\vec{e}_a(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_a(\vec{r}') + \int_B d^2s' \frac{\vec{e}_a(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_b(\vec{r}') \right] \quad (6.12)$$

und

$$D_b(\vec{r}) = \frac{\vec{e}_b(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|^3} + \frac{1}{4\pi} \left( \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \left[ \int_A d^2s' \frac{\vec{e}_b(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_a(\vec{r}') + \int_B d^2s' \frac{\vec{e}_b(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_b(\vec{r}') \right] \quad (6.13)$$

mit vier Kernen und zwei Inhomogenitäten. Dabei treten aber nur in zwei der vier Kerne die in 5.4 besprochenen diagonalen Singularitäten auf.

Damit wird die Verallgemeinerung von (5.22) für einen derartigen Fall benötigt:

$$\sum_{j=1}^{N_a} \left[ \delta_{ij} (1 + \lambda J_{aa}(x_j) - \lambda I_{aa}(x_j)) - (1 - \delta_{ij}) \lambda w_j K_{aa}(x_i, x_j) \right] f_a(x_j) - \lambda \sum_{j=N_a+1}^{N_a+N_b} w_j K_{ab}(x_i, x_j) f_b(x_j) = g_a(x_i) \quad (6.14)$$

und

$$\begin{aligned}
 & -\lambda \sum_{j=1}^{N_a} w_j K_{ba}(x_i, x_j) f_a(x_j) + \sum_{j=N_a+1}^{N_a+N_b} \left[ \delta_{ij} (1 + \lambda J_{bb}(x_j) - \lambda I_{bb}(x_j)) - \right. \\
 & \left. (1 - \delta_{ij}) \lambda w_j K_{bb}(x_i, x_j) \right] f_b(x_j) = g_b(x_i) \quad (6.15)
 \end{aligned}$$

Der Index  $i$  läuft hier zwischen 1 und  $N_a + N_b$ . Wenn  $i$  zwischen 1 und  $N_a$  liegt, dann ist die gesuchte Funktion  $f_a$  und die Inhomogenität  $g_a$ , liegt  $i$  zwischen  $N_a + 1$  und  $N_a + N_b$ , dann ist die gesuchte Funktion  $f_b$  und die Inhomogenität  $g_b$ .

Für den Boden sollen die Ergebnisse der zwei dielektrischen Halbräume genutzt werden (siehe Abschnitt 6.1), was eine Näherung darstellt, denn der Boden des Zylinders ist nicht unendlich ausgedehnt wie die Grenzfläche zwischen den beiden Halbräumen. Der Kern für den Mantel des Zylinders ist im Anhang C.2 abgeleitet. Es bleiben der Kern des zweiten Integrals in (6.12) und der Kern des ersten Integrals in (6.13), die im Anhang C.3 aufgeführt sind.

Bei näherer Betrachtung der Kerne (C.24) und (C.26) ist jedoch festzustellen, dass diese Geometrie mit diesem Verfahren nicht behandelbar ist, denn diese beiden Kerne enthalten nicht-integrierte Singularitäten. Dies soll am Kern (C.24) näher erläutert werden. Der zu diskutierende Term ist

$$\int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\infty dz' R \frac{-z'}{[\rho^2 + R^2 - 2\rho R \cos(\varphi - \varphi') + z'^2]^{3/2}} \quad (6.16)$$

Führt man die  $z'$ -Integration aus, so erhält man

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{2\pi} d\varphi' R \frac{-1}{\sqrt{R^2 + \rho^2 - 2R\rho \cos(\varphi - \varphi')}} = \\
 & \int_0^{2\pi} d\varphi' R \frac{-1}{\sqrt{R^2 + \rho^2 - 2R\rho \cos\varphi'}} \quad (6.17)
 \end{aligned}$$

Im zweiten Schritt wurde ausgenutzt, dass das Problem rotationssymmetrisch ist und man daher ohne Einschränkung  $\varphi = 0$  setzen kann sowie, dass der Cosinus eine gerade Funktion ist. Nähert man sich nun mit  $\vec{r} = (\rho, \varphi, 0)_{cyl}$  auf dem Boden dem Mantel ( $\rho \rightarrow R$  mit  $\rho \geq 0$  und  $R \geq 0$ ) und betrachtet die Umgebung von  $\varphi' = 0$ , dann erhält man mit den ersten beiden nicht-verschwindenden Summanden der Taylor-Reihe für  $\cos \varphi'$  bei  $\varphi' \approx 0$  für den Integranden:

$$\frac{-R}{\sqrt{R^2 + \rho^2 - 2R\rho(1 - \varphi'^2/2)}} \stackrel{\rho \rightarrow R}{=} \frac{-1}{\sqrt{\varphi'^2}} \quad (6.18)$$

also einen nicht integrierbaren Ausdruck.

Auch physikalisch gesehen ist diese Geometrie problematisch. Erstens kann nicht erwartet werden, dass bei der Herstellung eines entsprechenden photonischen Kristalls, z.B. durch Ätztechniken, tatsächlich scharfe Kanten am unteren Ende des Luftzylinders entstehen. Zweitens erscheint auf der Grundlage der Gleichungen (4.22) und (4.21) der plötzliche Sprung des Normalenvektors beim Übergang vom ersten Integrations-Teilgebiet in das zweite wenig plausibel. Besonders der zweite Gedanke führt zum Vorschlag einer zweiten Geometrie, mit der dieses Problem nicht auftauchen sollte: Die Ersetzung der Kreisscheibe als Boden des Zylinders durch eine Halbkugel.

## 6.4 Zylinder mit Halbkugel als Boden

Der Grund und anfängliche Vorteil für der Bearbeitung der Geometrie des letzten Abschnitts 6.3 war, dass die einfachen Ergebnisse für die zwei dielektrischen Halbräume aus 6.1 verwendet werden konnten. Ähnlich kann das nur noch in der Kombination eines Zylindermantels mit einer Halbkugel erfolgen, wobei nun die Ergebnisse aus 6.2 weitestgehend übernommen werden sollen.

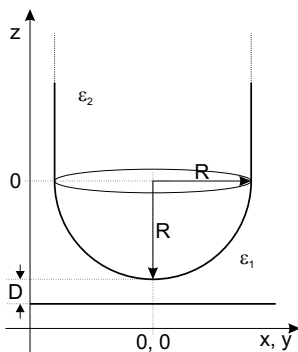


Abbildung 6.7: Ein dielektrischer Zylinder (DK  $\epsilon_2 = 1$ ) mit dem Radius  $R$  und einer Halbkugel mit gleichem Radius als Boden in einem anderen Dielektrikum (DK  $\epsilon_1 = 13.1$ ). Zusätzlich ist auch die Ebene eingezeichnet, in der sich Quelle und Testladung befinden. Der minimale Abstand zwischen der Ebene und dem Zylinder ist  $D$ .

Für diese Geometrie (siehe Abbildung 6.7) nimmt (4.21) bzw. (6.11) die folgende Form an:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_1 |\vec{r} - \vec{r}_1|} + \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\epsilon_1} \left( \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \left[ \int_{\text{Halbkugel}} d^2 s' \frac{-D_r(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Big|_{r'=R} + \int_{\text{Mantel}} d^2 s' \frac{-D_\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Big|_{\rho'=R} \right] \quad (6.19)$$

Hier wurde berücksichtigt, dass der Normalenvektor für den Boden  $-\vec{e}_r$  (siehe zu den Koordinaten Anhang C.1) und für den Zylindermantel  $-\vec{e}_\rho$  (siehe Anhang C.2) ist. Aus der Integralgleichung (4.22) werden wieder die zwei gekoppelten Integralgleichungen

chungen (6.12) und (6.13), die hier folgende Form annehmen:

$$\begin{aligned}
 -D_r(\vec{r}) = & -\frac{\vec{e}_r(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|^3} + \\
 & \frac{1}{4\pi} \left( \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \left[ \int_{\text{Halbkugel}} d^2 s' \frac{\vec{e}_r(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_r(\vec{r}') \Big|_{r'=R} + \right. \\
 & \left. \int_{\text{Mantel}} d^2 s' \frac{\vec{e}_r(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_\rho(\vec{r}') \Big|_{\rho'=R} \right] \quad (6.20)
 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 -D_\rho(\vec{r}) = & -\frac{\vec{e}_\rho(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|^3} + \\
 & \frac{1}{4\pi} \left( \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \left[ \int_{\text{Halbkugel}} d^2 s' \frac{\vec{e}_\rho(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_r(\vec{r}') \Big|_{z'=0} + \right. \\
 & \left. \int_{\text{Mantel}} d^2 s' \frac{\vec{e}_\rho(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} D_\rho(\vec{r}') \Big|_{\rho'=R} \right] \quad (6.21)
 \end{aligned}$$

Für den ersten Kern in (6.20) kann der Kern (C.7) verwendet werden, der bereits für die Kugel abgeleitet wurde, ebenso der Kern (C.20) für den zweiten Kern in (6.21). Die beiden anderen Kerne finden sich im Anhang C.4.

Die Abbildung 6.8 zeigt Ergebnisse der Rechnung für diese Geometrie. Die bei der Lösung verwendeten Integrationsparameter sind:

- 39  $\varphi$ -Punkte in der Extended Open Mid-Point Formula, um die Rotationssymmetrie zu berücksichtigen
- 59  $\vartheta$ -Punkte mit Gauß-Legendre-Integration, um insbesondere den Bereich  $\vartheta \rightarrow \pi$  ausreichend aufzulösen,
- 21  $z$ -Punkte mit Gauß-Legendre-Integration.

Die vier Teile der Abbildung sind entsprechend der Abbildung 6.4 zu verstehen. Man erkennt, dass die Ergebnisse sehr gut mit

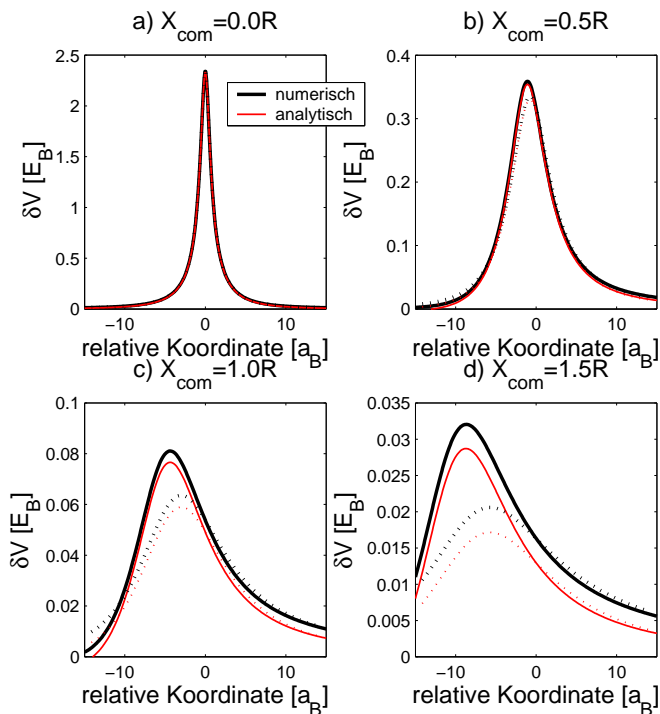


Abbildung 6.8: Die Korrektur  $\delta V$  zum gewöhnlichen Coulomb-Potential für einen Zylinder mit einer Halbkugel als unterem Abschluss, beide haben den Radius  $R = 10$ . Der Quantenfilm, der Quelle und Testladung enthält, befindet sich  $D = 0.3$  unter dem Rand der Halbkugel (siehe Abbildung 6.7). Dargestellt sind die Ergebnisse der numerischen Rechnung für die beschriebene Struktur und zum Vergleich analytische Ergebnisse nur für eine Kugel (siehe auch Abbildung 6.4).

der analytischen Lösung nur für die Kugel übereinstimmen, insbesondere, wenn sich die Quellladung direkt unter dem Zylinder

befindet (Fall a) links oben). Liegt die Quelle weiter in Richtung Rand des Zylinders, so steigt dessen Einfluss, und die Korrektur des Coulomb-Potentials wird etwas größer als für die Kugel allein. Das zeigt, dass der wesentliche Beitrag zur Korrektur durch die Halbkugel entsteht, auch wenn die Quelle bereits weit vom Zentrum des Zylinders entfernt ist. Gleichzeitig nimmt die Potential-Korrektur rapide ab, weil der kleinste Abstand der Quelle zur Grenzfläche wesentlich größer als  $D$  wird.

Um die Verstärkung des gewöhnlichen Coulomb-Potentials durch die Anwesenheit einer Grenzfläche zweier Dielektrika deutlicher herauszustellen, sollte sich diese Grenzfläche also über einen größeren Bereich hinweg nahe am Quantenfilm befinden. Um das zu erreichen, soll im nächsten Schritt die Kugel in  $z$ -Richtung abgeflacht werden, die Kugel also in ein flaches Rotationsellipsoid geändert werden. Als Vorbetrachtung und als Test dazu soll zunächst das Rotationsellipsoid allein diskutiert werden.

## 6.5 Flaches Rotationsellipsoid

Ich betrachte jetzt ein Ellipsoid mit den Halbachsen  $a, b, c$  (siehe auch Abbildung 6.9), wobei  $a = b > c$  gelten soll, damit der Quantenfilm näher an die Grenzfläche der beiden Dielektrika gerückt werden kann, und damit im nächsten Schritt ein Zylinder mit kreisförmigem Querschnitt auf die untere Hälfte des Ellipsoids an Stelle der oberen Hälfte gesetzt werden kann.

Die zur Beschreibung eines solchen Ellipsoids günstigen Koordinaten finden sich in Tafelwerken, z.B. [59]. Sie sind im Anhang C.5 aufgeführt. Man erhält insbesondere für die beiden Halbachsen  $a$  und  $c$ :

$$\begin{aligned} a = b &= l\sqrt{1 + \xi^2} \\ c &= l\xi \end{aligned} \tag{6.22}$$

Damit kann das Rotationsellipsoid numerisch völlig analog

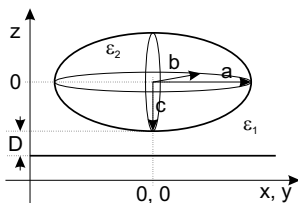


Abbildung 6.9: Ein dielektrisches abgeflachtes Rotationsellipsoid ( $\epsilon_2 = 1$ ) mit seinen Halbachsen  $a = b > c$ . Dargestellt ist auch die Ebene im umgebenden Dielektrikum ( $\epsilon_1 = 13.1$ ), in der sich Quelle und Testladung befinden. Der kleinste Abstand zwischen Rotationsellipsoid und Ebene ist  $D$ .

zur Kugel behandelt werden, und im ersten Schritt sollen die Ergebnisse für ein nur minimal abgeflachtes Rotationsellipsoid mit  $a/c = 1.01$  präsentiert werden, um diese Ergebnisse mit denen für die dielektrische Kugel aus dem Abschnitt 6.2 vergleichen zu können. Der andere Extremfall ist ein sehr großes Halbachsenverhältnis, also  $a/c \rightarrow \infty$ . Dann wird das Rotationsellipsoid zu einer ebenen Grenzfläche. Daher können die Ergebnisse für die zwei dielektrischen Halbräume ebenfalls zum Vergleich herangezogen werden. Da ein sehr kugelähnliches Ellipsoid die größten Abstände zwischen der Oberfläche und der Ebene mit den zwei Ladungen bedingt und eine ebene Grenzfläche die kleinsten Abstände, sollten die Ergebnisse für ein Rotationsellipsoid nach unten durch die Ergebnisse für die Kugel und nach oben durch die Ergebnisse für die zwei Halbräume beschränkt sein. In der Abbildung 6.10 ist zu erkennen, dass die Ergebnisse für ein Ellipsoid mit  $a/c = 1.01$  sehr gut mit den Resultaten für die Kugel übereinstimmen. Insbesondere findet man auch hier die Anisotropie der Korrektur und damit des Coulomb-Potentials (siehe dazu auch Abbildung 6.4). Zu beachten ist lediglich, dass jetzt nicht wie bei der Kugel  $\vartheta \in [0, \pi]$  eine unabhängige Variable ist, sondern  $\eta = \cos \vartheta \in [1, -1]$ . Damit werden nun die Stützstellen der Inte-



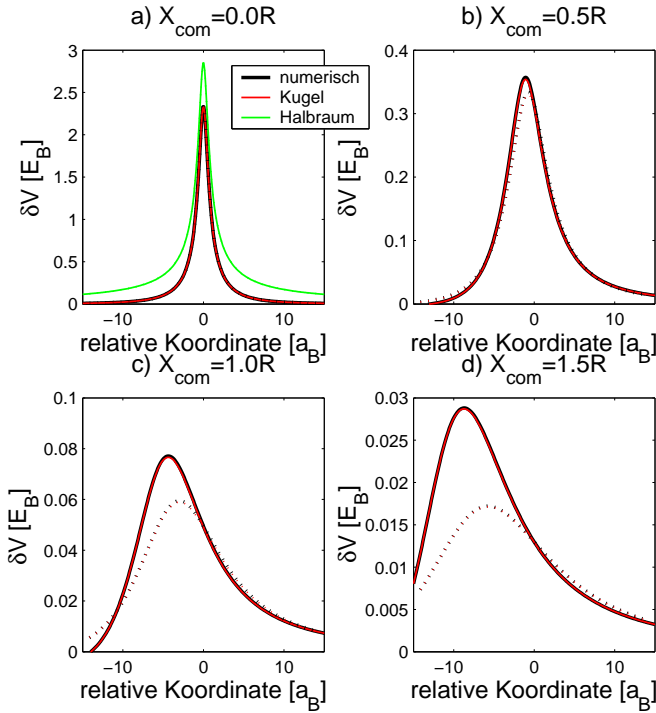


Abbildung 6.10: Korrektur  $\delta V$  zum gewöhnlichen Coulomb-Potential für ein Rotationsellipsoid (schwarz) mit dem Halbachsenverhältnis  $a/c = 1.01$  ( $D = 0.3$ , siehe auch Abbildung 6.9 und 6.4). Zum Vergleich sind auch die analytischen Ergebnisse für eine Kugel (rot) und für zwei Halbräume (grün, nur in a) dargestellt.

gration anders im Integrationsbereich verteilt, so dass jetzt mehr Integrationspunkte erforderlich sind, um die analytischen Resultate exakt zu reproduzieren, besonders direkt unterhalb des Ellipsoids. Die Parameter für die Integration sind:

- 39  $\phi$ -Punkte mit Extended Open Midpoint Formula wegen der Rotationssymmetrie und
- 79  $\eta$ -Punkte mit Gauß-Legendre-Integration für eine adäquate Berücksichtigung des Bereichs  $\eta \rightarrow -1$ .

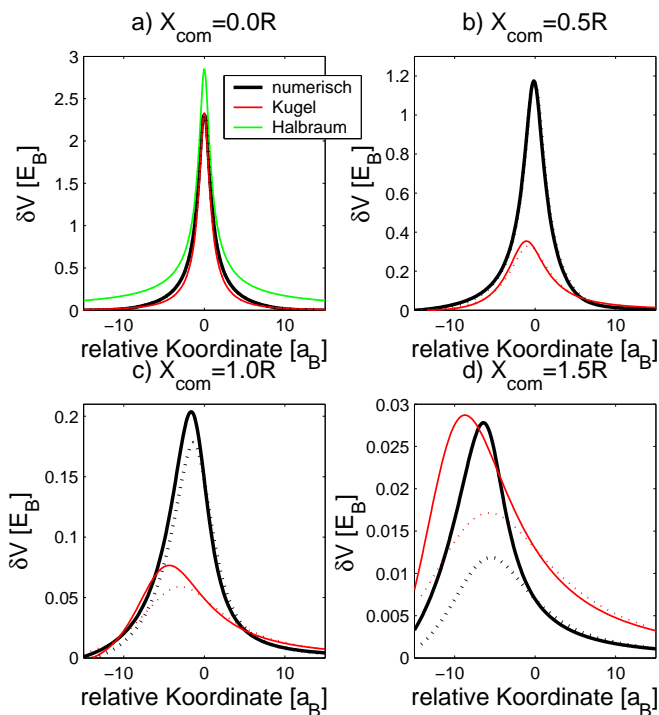


Abbildung 6.11: Korrektur  $\delta V$  (schwarz) zum gewöhnlichen Coulomb-Potential für ein Rotationsellipsoid mit dem Halbachsenverhältnis  $a/c = 5.0$ . Diese Abbildung ist entsprechend der Abbildung 6.10 zu verstehen.

Die Abbildung 6.11 zeigt die Ergebnisse für ein stark abge-

flachtes Rotationsellipsoid. Hier wird deutlich, dass jetzt die Grenzfläche zwischen Matrix und Rotationsellipsoid näher am Quantenfilm ist als bei der Kugel, denn die numerischen Ergebnisse weichen insbesondere dann, wenn die Quelle von direkt unterhalb des Mittelpunkts des Ellipsoids (a) weiter nach außen verschoben wird (b, c), deutlich von denen für die Kugel ab. Befindet sich die Quellladung weit entfernt von der Grenzfläche (d), dann unterscheiden sich die Ergebnisse für das Ellipsoid wieder nur wenig von denen für die Kugel. Für die Vergleichsrechnungen mit der Kugel wurde diese so plziert, dass der minimale Abstand  $D$  zwischen der Ebene mit den beiden Ladungen und der Grenzfläche zwischen Matrix und Kugel ebenso groß ist wie bei der Rechnung mit dem Rotationsellipsoid.

Nach diesen Vorbetrachtungen soll nun die vielversprechendste Geometrie für Grundbausteine eines zweidimensionalen photonischen Kristalls untersucht werden, der Zylinder mit einem halben flachen Rotationsellipsoid als Boden.

## 6.6 Zylinder mit halbem Rotationsellipsoid als Boden

Das halbe flache Rotationsellipsoid mit angesetztem Zylinder ist in Abbildung 6.12 skizziert. Die beiden Grundobjekte sind passend zusammengesetzt, d.h. es gilt  $R = a$ .

Die Vorarbeiten aus dem Abschnitt 6.4 können weitgehend übernommen werden, insbesondere die Gleichungen (6.19), (6.20) und (6.21), die nur leicht modifiziert werden müssen. Die benötigten Kerne sind im Anhang C.6 aufgeführt.

Die Rechnungen wurden mit den in den vorherigen Abschnitten 6.4 und 6.5 genannten Parametern durchgeführt. Die Resultate sind in Abbildung 6.13 dargestellt.

Als Vergleich dienen wieder die analytischen Ergebnisse für zwei Halbräume (nur im Bildteil a) und die Kugel. Befindet sich die Quelle direkt unter dem Zylinder (a), dann liegt die Korrektur

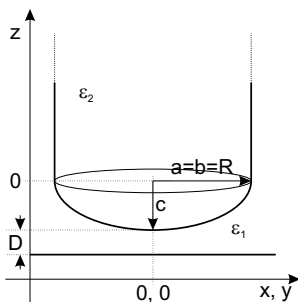


Abbildung 6.12: Ein dielektrischer Zylinder (DK  $\epsilon_2 = 1$ ) mit dem Radius  $R$  sowie mit einem halben flachen Rotationsellipsoid mit den Halbachsen  $a = b > c$  als Boden. Der Zylinder ist von einem Dielektrikum (DK  $\epsilon_1 = 13.1$ ) umgeben, in dem sich auch die Ebene befindet, in der sich Quelle und Testladung bewegen können. Der minimale Abstand zwischen Zylinderboden und Ebene ist  $D$ .

tur  $\delta V$  zwischen den Resultaten von Halbräumen und Kugel, welche die beiden Grenzfälle des Ellipsoids darstellen. Der Einfluß des Zylindermantels ist gering. Rückt die Quellladung nach außen, dann ist die Korrektur für den Zylinder deutlich größer als für die Kugel, solange die Grenzfläche des Ellipsoids näher an der Ebene als die Kugel ist ( $b, c$ ). Befindet sich die Quelle nicht mehr unter dem Zylinder ( $d$ ), ist die Korrektur mit denen für die Kugel vergleichbar. Das Resultat zeigt, dass der wesentliche Beitrag zur Korrektur vom halben Rotationsellipsoid stammt, das als Boden des Zylinders viel näher an der Ebene mit den beiden Ladungen als der Mantel ist. Wie in den Ergebnissen für die Kugel und das Rotationsellipsoid erkennt man auch hier wieder die Anisotropie der Korrektur  $\delta V$  durch den Unterschied zwischen durchgezogener und gepunkteter Linie.

Die starke Abnahme der Korrektur, wenn sich die Quelle nicht unterhalb des Zylinders befindet, rechtfertigt die Berücksichti-

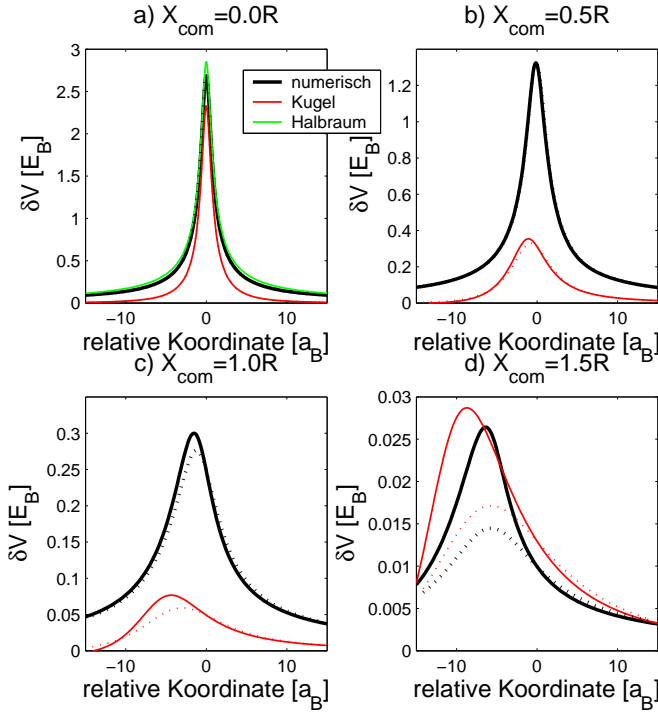


Abbildung 6.13: Korrektur  $\delta V$  zum gewöhnlichen Coulomb-Potential für einen dielektrischen Zylinder mit halbem flachem Rotationsellipsoid (schwarz,  $R = 10$ ,  $a/c = 5$ ,  $D = 0.3$ , siehe auch die Abbildungen 6.9 und 6.4). Zum Vergleich sind die analytischen Ergebnisse für eine Kugel (rot) und für zwei Halbräume (grün, nur im Teil a) ebenfalls dargestellt.

gung nur eines Zylinders an Stelle einer größeren Anzahl von Grenzflächen. Wie erläutert wurde, stammt der wesentliche Beitrag zur Korrektur des gewöhnlichen Coulomb-Potentials von den Grenzflächen nahe der Ebene mit den Ladungen. Die näch-

sten Grenzflächen in einem photonischen Kristall mit einem zu  $D$  vergleichbaren Vertikalabstand sind weitere Böden von Zylindern. Diese haben aber eine horizontale Entfernung von mehr als  $2R$ , so dass deren Einfluß wegen der starken Abhängigkeit der induzierten Polarisation vom Abstand zwischen Quelle und Oberflächenelement vernachlässigbar klein ist. Größere Änderungen durch die Berücksichtigung weiterer Zylinder sind also eher zwischen zwei Zylindern zu erwarten, denn dort ist der Abstand zu Grenzflächen mehrerer Zylinder etwa gleich groß. Wie z.B. in Abbildung 6.13 gezeigt wurde, ist die Korrektur  $\delta V$  für solche Orte aber zwei Größenordnungen kleiner als direkt unter einem Zylinder und immer noch eine Größenordnung kleiner als für beliebige Orte unterhalb des Zylinders.

Auch wenn weitere Grenzflächen nicht einfach additiv, sondern innerhalb der Integralgleichung (4.22) und (4.21) berücksichtigt werden, so wird dies zu keinen wesentlichen Modifikationen führen. Dann wäre auch Induktion von Oberflächenpolarisation auf einer Zylinderoberfläche durch Oberflächenpolarisation auf einer anderen Zylinderoberfläche korrekt beschrieben. Jedoch ist schon die Polarisation auf dem Zylindermantel durch eine Quellladung mit geringem Horizontalabstand sehr klein und führt nur zu geringen Korrekturen des Beitrags vom Zylinderboden.

Daher ist absehbar, dass die Hinzunahme weiterer Zylinder nur zu sehr geringen und damit vernachlässigbaren Änderungen an den hier gezeigten Ergebnissen führen wird.

# 7 Lineare optische Eigenschaften von Halbleiter-Quantenfilmen in der Nähe eines photonischen Kristalls

Um die Auswirkungen der modifizierten Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch zu demonstrieren, sollen in diesem Abschnitt die linearen optischen Eigenschaften eines Halbleiter-Quantenfilms in unmittelbarer Umgebung eines zweidimensionalen photonischen Kristalls untersucht werden.

## 7.1 Bewegungsgleichung für die lineare mikroskopische Polarisation

Der Hamilton-Operator für dieses System lässt sich formal schreiben als

$$H = H_0 + H_C + H_I \quad (7.1)$$

Dabei ist  $H_0$  der der freie Anteil

$$H_0 = -\frac{1}{2m_e}\nabla_e^2 - \frac{1}{2m_h}\nabla_h^2 + E_{gap} \quad (7.2)$$

mit den effektiven Massen  $m_e$  für Elektronen in einem Leitungsband und  $m_h$  für Löcher in einem Valenzband sowie der Band-

lücke  $E_{gap}$ . Dieser Hamilton-Operator ist für das vorliegende inhomogene System eine Näherung, da für die Bandstruktur, die hier über die parabolische Näherung mit den beiden effektiven Massen sowie der Lückenenergie eingeht, Eigenschaften homogener Systeme berücksichtigt wurden.

Der Anteil für die Coulomb-Wechselwirkung

$$H_C = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \rho(\vec{r}, t) V_C(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}', t) \quad (7.3)$$

enthält verglichen mit unstrukturiertem Volumenmaterial einen zusätzlichen Term, da die Selbstwechselwirkung

$$\Sigma(\vec{r}) = \frac{1}{2} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} [V_C(\vec{r}, \vec{r}') - V_0(\vec{r}, \vec{r}')] \quad (7.4)$$

der Ladungsträger mit sich selbst wegen der räumlichen Inhomogenität des Systems nicht verschwindet [60]. Daher ist:

$$H_C = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' [\rho(\vec{r}, t) V_C(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}', t)]_N + \frac{e^2}{2} \int d^3r (n_e(\vec{r}, t) + n_h(\vec{r}, t)) \delta V_C(\vec{r}, \vec{r}) \quad (7.5)$$

wobei der Index  $N$  die Normalordnung der Operatoren anzeigt. Dabei wurde für die Ladungsdichte

$$\rho(\vec{r}, t) = e(n_h(\vec{r}, t) - n_e(\vec{r}, t)) \quad (7.6)$$

sowie für die Ladungsträgerdichten  $n_e$  für Elektronen und  $n_h$  für Löcher

$$n_{e/h}(\vec{r}, t) = \Psi_{e/h}^\dagger(\vec{r}, t) \Psi_{e/h}(\vec{r}, t) \quad (7.7)$$

genutzt. Die Operatoren  $\Psi_{e/h}^\dagger$  und  $\Psi_{e/h}$  sind Erzeuger und Vernichter eines Elektrons oder Lochs.

Der Anteil  $H_I$  am Hamilton-Operator beschreibt die Wechselwirkung des Systems mit einem von außen eingestrahlt Lichtfeld in Dipol-Näherung

$$H_I = -\vec{d} \cdot \vec{E}_t \delta(\vec{r}_e - \vec{r}_h) \quad (7.8)$$



mit dem Dipol-Matrixelement  $\vec{d}$  und dem externen transversalen Feld  $\vec{E}_t$ . Diese Form des Wechselwirkungs-Hamilton-Operators ist ursprünglich für homogene Systeme bestimmt worden, in denen wegen der Ladungsneutralität keine Monopol-Wechselwirkung auftreten kann und höhere Multipolmomente deutlich schwächer als das Dipolmoment sind. Im Rahmen dieser Theorie für inhomogene Systeme spielen Monopol-Terme wiederum keine Rolle, denn auch hier wird es nicht zur räumlichen Trennung von Ladungsträgern kommen, weil das zusätzliche Potential in 7.5 für Elektronen und Löcher gleich ist, und daher wird überall Ladungsneutralität herrschen. Durch die Inhomogenität des Systems könnten aber die vernachlässigten Multipole höherer Ordnung an Einfluss gewinnen, so dass die hier genutzte Dipol-Wechselwirkung eine Näherung darstellt.

Für die lineare mikroskopische Polarisation

$$p(\vec{r}_e, \vec{r}_h, t) = \Psi_e^\dagger(\vec{r}_e, t) \Psi_h(\vec{r}_h, t) \quad (7.9)$$

in diesem System, das aus dem Grundzustand mit einem schwachen optischen Puls angeregt wird, gilt dann die Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} i\partial_t p(\vec{r}_e, \vec{r}_h, t) = & \left[ E_g - \frac{1}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{1}{2m_h} \nabla_h^2 \right. \\ & \left. - e^2 V_C(\vec{r}_e, \vec{r}_h) + \frac{e^2}{2} (\delta V(\vec{r}_e, \vec{r}_e) + \delta V(\vec{r}_h, \vec{r}_h)) \right] p(\vec{r}_e, \vec{r}_h, t) \\ & - \vec{d} \cdot \vec{E}_t(\vec{r}_e, t) \delta(\vec{r}_e - \vec{r}_h) \end{aligned} \quad (7.10)$$

Diese Gleichung lässt sich durch die Einführung von Relativ- und Schwerpunktskoordinaten

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \vec{r}_e - \vec{r}_h \\ \vec{R} &= \frac{m_e}{m_e + m_h} \vec{r}_e + \frac{m_h}{m_e + m_h} \vec{r}_h \end{aligned} \quad (7.11)$$

sowie von Relativ- und Schwerpunkts-Impuls

$$\begin{aligned}\vec{p}_{rel} &= \frac{m_h}{m_e + m_h} \vec{p}_e - \frac{m_e}{m_e + m_h} \vec{p}_h \\ \vec{p}_{com} &= \vec{p}_e + \vec{p}_h\end{aligned}\quad (7.12)$$

in eine Gleichung mit  $\vec{R}$  und  $\vec{r}$  als unabhängigen Variablen an Stelle der zwei Ortsvektoren  $\vec{r}_e$  und  $\vec{r}_h$  überführen:

$$\begin{aligned}i\partial_t p(\vec{R}, \vec{r}, t) &= \left[ E_g - \frac{1}{2M} \nabla_R^2 - \frac{1}{2\mu} \nabla_r^2 - e^2 V_C(\vec{R}, \vec{r}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{e^2}{2} (\delta V(\vec{R} + M_h \vec{r}, 0) + \delta V(\vec{R} - M_e \vec{r}, 0)) \right] p(\vec{R}, \vec{r}, t) \\ &\quad - \vec{d} \cdot \vec{E}_t(\vec{R}, \vec{r}, t) \delta(\vec{r})\end{aligned}\quad (7.13)$$

mit der reduzierten Masse  $\mu$ , der Gesamtmasse  $M$  sowie den Anteilen  $M_e$  und  $M_h$  an der Gesamtmasse

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{m_e m_h}{m_e + m_h} \\ M &= m_e + m_h \\ M_e &= m_e / M \\ M_h &= m_h / M\end{aligned}\quad (7.14)$$

Wenn das Coulomb-Potential nur vom Relativvektor  $\vec{r}$  abhängt, z.B. in einem homogenen System, dann kann Gleichung (7.13) mit einem Produktansatz

$$p(\vec{R}, \vec{r}, t) = p_R(\vec{R}, t) p_r(\vec{r}, t) \quad (7.15)$$

in zwei Gleichungen zerlegt werden, die jeweils noch eine räumlichen Koordinate enthalten. Die zur dabei entstehenden inhomogenen Gleichung für den Relativanteil gehörende homogene Gleichung ist die Wannier-Gleichung. Bestimmt man ihre Eigenfunktionen und Eigenwerte, kann man die inhomoge-

ne Gleichung lösen und damit sowohl die Elektron-Loch-Paar-Suszeptibilität als auch die Absorption berechnen [61]. Man erhält so die Elliott-Formel, die eine Serie von scharfen Linien unterhalb der Bandkante und ein Kontinuum oberhalb der Bandkante enthält. Die scharfen Linien sind gebundenen Zuständen aus Elektron und Loch, den Exzitonen, zugeordnet. Für zweidimensionale Systeme liegt der niedrigste gebundene Zustand bei  $-4E_B$  und das Kontinuum folgt einer Stufenfunktion, die ihren Sprung bei der Bandlückenenergie  $E_{gap}$  hat. Die Energie  $E_B$  ist dabei die dreidimensionale Exziton-Bindungsenergie

$$E_B = \frac{\hbar^2}{2\mu a_B^2} = \frac{e^2}{2\epsilon_1 a_B} = \frac{e^4 \mu}{2\epsilon_1^2 \hbar^2} \quad (7.16)$$

Hier befindet sich jedoch der Quantenfilm in der Nähe eines photonischen Kristalls und damit lässt sich die Gleichung (7.13) nicht durch einen Produktansatz lösen, sondern die Schwerpunktsabhängigkeit muss gleichzeitig mit der Relativbewegung berücksichtigt werden. Wie im vergangenen Abschnitt 6 gezeigt wurde, ist die Coulomb-Wechselwirkung für Schwerpunkte sehr nah an einer Grenzfläche durch den zusätzlichen Einfluss der induzierten Oberflächenpolarisation verstärkt, d.h. die Bindungsenergie der gebundenen Zustände ist nahe einer Grenzfläche größer als weiter von ihr entfernt. Im Absorptionsspektrum sollten daher die gebundenen Zustände an Orten nahe einer Grenzfläche zu kleineren Energien als  $-4E_B$  schieben. Gleichzeitig wirken jedoch auch die zusätzlichen Ein-Teilchen-Beiträge durch die Wechselwirkung mit der Selbst-Spiegelladung. Auch diese Beiträge werden wie der Zwei-Teilchen-Beitrag nahe einer Grenzfläche größer als weiter von ihr entfernt, durch das entgegengesetzte Vorzeichen kommt es aber zu einer teilweisen Kompensation. Dieses Wechselspiel soll zunächst mit numerischen Rechnungen mit dem Schwerpunkt  $\vec{R} = (X_{com}, Y_{com})$  als Parameter untersucht werden, bevor abschließend auch die Schwerpunktsbewegung numerisch adäquat berücksichtigt wird.

## 7.2 Lokale Spektren

Wenn der Schwerpunkt des Elektron-Loch-Paares nur parametrisch berücksichtigt wird, dann reduziert sich (7.13) auf:

$$\begin{aligned}
 i\partial_t p(\vec{R}, \vec{r}, t) = & \left[ E_g - \frac{1}{2\mu} \nabla_r^2 - e^2 V_C(\vec{R}, \vec{r}) \right. \\
 & + \frac{e^2}{2} (\delta V(\vec{R} + M_h \vec{r}, 0) + \delta V(\vec{R} - M_e \vec{r}, 0)) \Big] p(\vec{R}, \vec{r}, t) \\
 & - \vec{d} \cdot \vec{E}_l(\vec{R}, \vec{r}, t) \delta(\vec{r})
 \end{aligned} \tag{7.17}$$

Damit kann diese Gleichung auf einem zweidimensionalen Ortsgitter zur Diskretisierung des Nabla-Operators und mit Hilfe eines Differenzen-Schemas zweiter Ordnung für die Zeitableitung [62, 63] gelöst werden. Neben den bereits im Abschnitt 6 genannten Materialparametern für einen zweidimensionalen photonischen Kristall aus luftgefüllten Zylindern in GaAs wurden folgende zusätzlich verwendet: effektive Elektronenmasse  $m_e = 0.066m_0$  mit der absoluten Elektronenmasse  $m_0$ , Massenverhältnis  $m_h/m_e = 4$  und eine phänomenologische Dämpfung von  $\gamma = 0.2E_B$ . Das Ortsgitter für die hier gezeigten Rechnungen hatte eine Auflösung von mindestens  $0.1a_B$ .

Abbildung 7.1 zeigt Ergebnisse für den Imaginärteil der Suszeptibilität als Maß für die Absorption für verschiedene Schwerpunkte  $\vec{R} = (X_{com}, 0)$ . Der verwendete Zylinderboden hat ein Halbachsenverhältnis von  $a/c = 5$ , und der Quantenfilm befindet sich  $D = 0.2a_B$  unterhalb des Zylinders. Wenn sich der Schwerpunkt unter dem Dielektrikum oder unter dem Rand eines Zylinders befindet (blaue Linie), dann entspricht das Ergebnis dem zweidimensionalen Fall ohne dielektrisch strukturierte Umgebung: Die Bindungsenergie des Exzitons ist  $4E_B$ , das Kontinuum beginnt bei der Bandkante, also bei  $E - E_{gap} = 0$ . Direkt unterhalb der Bandkante ist noch schwach das 2s-Exziton zu sehen.

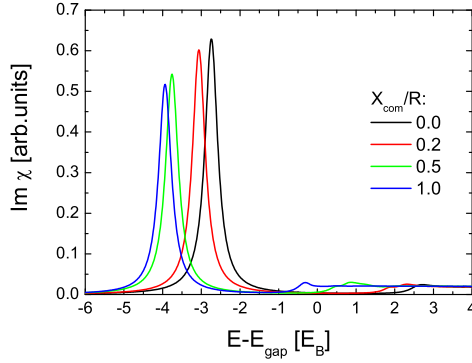


Abbildung 7.1: Lineare Spektren für einen Quantenfilm mit Abstand  $D = 0.2a_B$  zum photonischen Kristall aus Zylindern mit  $a/c = 5$  und  $\epsilon_{\text{cyl}} = 1.0$  sowie verschiedene feste Schwerpunkte des Elektron-Loch-Paares. Der Nullpunkt der Energieskala ist die Bandlücke des idealen Quantenfilms. Für die Rechnungen wurde eine phänomenologische Dämpfung von  $0.2E_B$  verwendet.

Rückt der Schwerpunkt in Richtung der Zylinderachse (grüne, rote und schwarze Linie), dann beginnt das Kontinuum bei immer höheren Energien, d.h. die Bandlücke wird effektiv größer. Das ist die Auswirkung der Wechselwirkung der beiden Ladungen mit ihren jeweiligen Selbst-Spiegelladungen. Die exzitonische Resonanz verschiebt ebenfalls zu höheren Energien, jedoch nicht so stark wie die Bandkante. Liegt z.B. der Schwerpunkt direkt unterhalb des Zylinders, so beginnt das Kontinuum bei  $E - E_{\text{gap}} = 3E_B$  und die exzitonische Resonanz befindet sich bei  $E - E_{\text{gap}} = -2.8E_B$ . Daraus resultiert eine Bindungsenergie von  $5.8E_B$  für ein Exziton, dessen Schwerpunkt direkt unterhalb des Zylinders liegt, d.h., es ist etwa 1.5 Mal so stark gebunden wie

ohne dielektrisch strukturierte Umgebung. Durch die größere Bindungsenergie ist außerdem die größere Oszillatorstärke des Exzitons mit  $\vec{R} = (0,0)$  begründet.

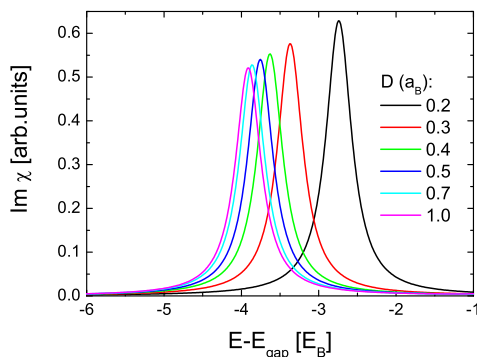


Abbildung 7.2: Lineare Spektren für ein System wie in Abbildung 7.1. Hier ist der Schwerpunkt des Elektron-Loch-Paares bei  $X_{\text{com}} = Y_{\text{com}} = 0.0$  festgehalten und der Abstand  $D$  zwischen Zylinder und Quantenfilm wird variiert.

In Abbildung 7.2 sind die Ergebnisse für einen festen Schwerpunkt  $\vec{R} = (0,0)$ , aber verschiedenen Abständen  $D$  zwischen Zylinder und Halbleiter-Quantenfilm dargestellt. Für große Abstände zeigen die Ergebnisse wieder das bekannte Verhalten aus dem Fall ohne dielektrisch strukturierte Umgebung. Rückt der Quantenfilm näher an den Zylinder, dann werden die Korrekturen zum gewöhnlichen Coulomb-Potential größer und es kommt zur Verschiebung der exzitonenischen Energie.

Die Ergebnisse weiterer derartiger Rechnungen sind in der Abbildung 7.3 zusammengefasst. Sie zeigt die exzitonenische Energie für verschiedene Halbachsenverhältnisse  $a/c$  des Zylinderbodens und für verschiedene Schwerpunkte  $\vec{R} = (X_{\text{com}}, 0)$  des

Elektron-Loch-Paare, wenn sich der Quantenfilm  $D = 0.2a_B$  unterhalb des Zylinders befindet. Für Schwerpunkte in der Nähe

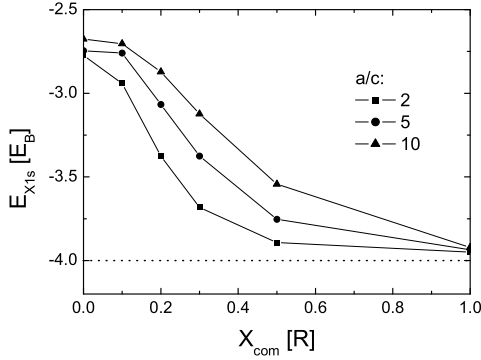


Abbildung 7.3: Exzitronische Energie für verschiedene Halbachsenverhältnisse des Zylinderbodens und verschiedene Schwerpunkte des Elektron-Loch-Paars, wenn der Abstand  $D$  zwischen Zylinder und Quantenfilm  $0.2a_B$  ist.

und jenseits des Zylinderrandes erhält man unabhängig vom Halbachsenverhältnis wieder das bekannte Resultat  $E - E_{gap} = -4E_B$  vom idealen Quantenfilm (gepunktete Linie). Je stärker der Boden des Zylinders gekrümmt ist, desto eher rückt die Grenzfläche Luft-GaAs an den Quantenfilm heran und desto eher verschiebt die exzitronische Energie zu größeren Werten, wenn der Schwerpunkt des Elektron-Loch-Paars in Richtung Zylinderachse verschoben wird. Befindet sich der Schwerpunkt direkt unterhalb des Zylinders, dann stimmen die Ergebnisse für alle drei Fälle wieder nahezu überein.

### 7.3 Modellrechnung für $\epsilon_{cyl} \gg \epsilon_{matrix}$

Wie im vergangenen Abschnitt 7.2 demonstriert wurde, bietet die Kombination aus Halbleiter-Quantenfilm und photonischem Kristall Möglichkeiten, die Eigenschaften des Systems hinsichtlich der Licht-Materie-Wechselwirkung durch die Geometrie zu verändern. Jetzt soll untersucht werden, inwiefern die Auswahl der Materialien für den photonischen Kristall die Eigenschaften bestimmt. Dazu soll die Luft in den Zylindern durch ein Material mit sehr hohem Brechungsindex ersetzt werden, z.B. Wasser mit  $\epsilon_{cyl} = 80$ . Tatsächlich wird in einigen optischen Experimenten mit sogenannten "index matching liquids" gearbeitet. Das sind Flüssigkeiten mit geeigneter Dielektrizitätskonstanten, in die der Versuchsaufbau eingetaucht wird, um z.B. nicht gewünschte Glas-Luft-Grenzflächen zu vermeiden.

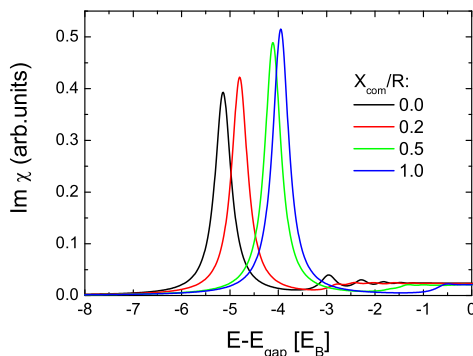


Abbildung 7.4: Spektren für Zylinder mit  $\epsilon_{cyl} = 80$  und  $a/c = 5$  sowie für verschiedene feste Schwerpunkte des Exzitons. Der Abstand  $D$  zwischen Quantenfilm und Zylinder beträgt  $0.2a_B$ .

In diesem System ist dann die Relation zwischen den beiden



beteiligten Dielektrizitätskonstanten entgegengesetzt zum bisher behandelten Fall, also  $\epsilon_{cyl} \gg \epsilon_{matrix}$ . Wie man am Vorfaktor  $(\epsilon_{matrix}/\epsilon_{cyl} - 1)$  des Integrals in den Gleichungen (4.21) und (4.22) erkennt, wird diese Materialwahl das Vorzeichen der induzierten Oberflächenpolarisation und auch der Korrektur zum gewöhnlichen Coulomb-Potential umkehren, wobei aber die diagonale 1 in der Matrixgleichung (5.22) erhalten bleibt. Daher ist zu erwarten, dass jetzt die Bindungsenergie des Exzitons kleiner als  $4E_B$  wird und, dass die Bandlücke durch die Selbstwechselwirkung der beiden Ladungen effektiv kleiner wird. Diese Erwartungen werden durch die Ergebnisse der numerischen Rechnung in Abbildung 7.4 bestätigt. Dort sind wieder lokale Spektren für verschiedene Schwerpunkte des Elektron-Loch-Paares relativ zu einem Zylinder mit  $\epsilon_{cyl} = 80$  und  $a/c = 5$  sowie für einen Abstand  $D = 0.2a_B$  Zylinder-Quantenfilm dargestellt. Für große Abstände zwischen der Zylinderachse und dem Schwerpunkt (blaue Linie) erhält man das Ergebnis vom idealen Quantenfilm ohne dielektrisch strukturierte Umgebung. Rückt der Schwerpunkt näher an die Zylinderachse (grüne, rote und schwarze Linie), dann fängt das Kontinuum bei immer kleineren Energien an, z.B. für den Schwerpunkt direkt unterhalb des Zylinders bei etwa  $-3E_B$  unterhalb der Bandkante des idealen Quantenfilms. Nutzt man wieder die Energiedifferenz zwischen der exzitonischen Energie und dem Anfang des Kontinuums als Abschätzung für die Bindungsenergie, so erhält man für diesen Fall etwa  $2E_B$ , also fast die Hälfte verglichen mit dem Fall des idealen Quantenfilms.

Außerdem erkennt man weitere, aber nur sehr schwache Signaturen gebundener Zustände am Beginn des Kontinuums, wenn der Schwerpunkt direkt unterhalb des Zylinders liegt. Um die Ursache dafür zu finden, wurde die Rechnung für diesen Schwerpunkt wiederholt, wobei einmal nur die Ein-Teilchen-Beiträge und einmal nur der Zwei-Teilchen-Beitrag der Korrektur zum gewöhnlichen Coulomb-Potential berücksichtigt wurden. Die Ein-Teilchen-Beiträge sind die beiden Selbstenergien  $e^2/2(\delta V(\vec{R} + M_h \vec{r}, 0) + \delta V(\vec{R} - M_e \vec{r}, 0))$  von Elektron und Loch in

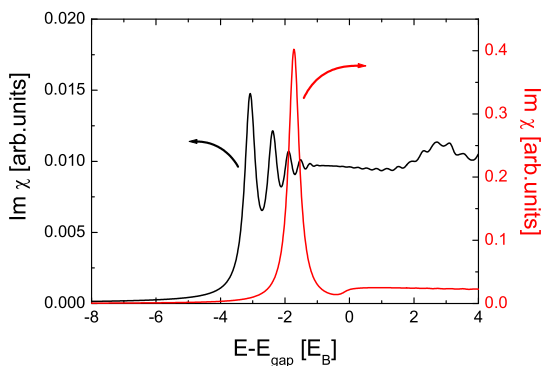


Abbildung 7.5: Wirkung nur des Ein-Teilchen- (schwarz) und nur des Zwei-Teilchen-Anteils (rot) des Potentials auf das Spektrum für die Geometrie wie in Abbildung 7.4, wenn der Schwerpunkt des Elektron-Loch-Paares zentral unter dem Zylinder liegt.

(7.17), der Zwei-Teilchen-Beitrag ist  $-e^2 V_C(\vec{R}, \vec{r})$  in (7.17). Die Ergebnisse dieser beiden Rechnungen zeigt Abbildung 7.5. Das Spektrum in schwarzer Farbe zeigt das Resultat nur mit den Ein-Teilchen-Beiträge, das Spektrum in roter Farbe das Ergebnis nur für den Zwei-Teilchen-Beitrag.

Das Spektrum in roter Farbe nur mit dem Zwei-Teilchen-Beitrag bestätigt die Abschätzung der Bindungsenergie des Exzitons von etwa  $2E_B$  für diesen Schwerpunkt. Das Spektrum in schwarz nur mit den Ein-Teilchen-Beiträgen zeigt die effektive Verringerung der Bandlücke und außerdem schwache Signaturen gebundener Zustände. Die Skalen der beiden Spektren links und rechts unterscheiden sich um den Faktor 20. Offensichtlich erzeugen die beiden Selbstenergien für diese Materialkombination ein attraktives Potential, in dem schwach gebundene Zustände für das Elektron-Loch-Paar existieren.

## 7.4 Quantenfilm-Exzitonen in einem photonischen Kristall

Abschließend soll die Gleichung (7.13) vollständig numerisch gelöst werden. Dazu muss die Diskretisierung des Realraums in vier Dimensionen vorgenommen werden. Für die Schwer-

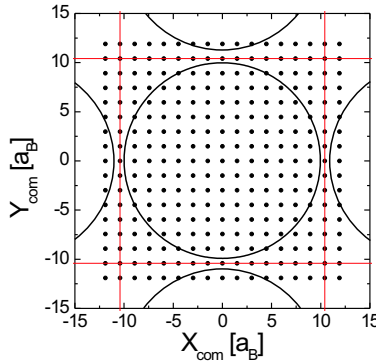


Abbildung 7.6: Einheitszelle in der Quantenfilm-Ebene für einen zweidimensionalen photonischen Kristall aus Zylindern in Rechteck-Geometrie. Die Zelle ist rot begrenzt, schwarz ist die Projektion des Zylinders eingezeichnet. Das durch die schwarzen Punkte gebildete Gitter wird für die Diskretisierung der Schwerpunktsbewegung verwendet. Die außerhalb der Einheitszelle liegenden Punkte enthalten die Werte vom jeweils gegenüberliegenden Rand der Zelle, um periodische Randbedingungen möglichst einfach im Computerprogramm zu implementieren. Das Verhältnis aus Zylinderradius und Abstand zweier Zylinder ist für diese Abbildung  $R/a_{cyl} = 0.48$ .

punktsbewegung kann in der  $x$ - $y$ -Ebene des Realraums eine

Einheitszelle definiert werden, denn das modifizierte Coulomb-Potential für ein Elektron-Loch-Paar wie im Abschnitt 6 berechnet hat dieselbe Periodizität wie der photonische Kristall. Da diese Einheitszelle eine größere lineare Ausdehnung als den Zylinderdurchmesser  $2R$  haben muss, siehe auch Abbildung 7.6, kann die Schwerpunktsbewegung nicht ebenso fein aufgelöst werden wie die Relativbewegung. Durch den Bedarf an Hauptspeicher und Rechenzeit hat sich eine Auflösung von  $15 \times 15$  Punkten für die Schwerpunktsbewegung als obere Grenze erwiesen. Vergleichsrechnungen mit nur  $9 \times 9$  Punkten liefern die gleichen Ergebnisse, so dass davon ausgegangen werden kann, dass keine numerischen Artefakte auf Grund unzureichender Auflösung in den Ergebnissen enthalten sind. Für jeden dieser Schwerpunkts-Gitterpunkte wird ein zweidimensionales Gitter für die Relativbewegung mit einer Auflösung von  $0.1a_B$  wie in den beiden vorherigen Abschnitten verwendet.

Abbildung 7.7 zeigt lineare Spektren für Elektron-Loch-Paare in einem Quantenfilm, der sich im Abstand  $D$  vor einem zweidimensionalen photonischen Kristall befindet. Darin sind dielektrische Zylinder mit Radius  $R = 10a_B$ , DK  $\epsilon_{cyl} = 1.0$  und elliptischem Boden mit  $a/c = 5$  in Rechteck-Geometrie mit einem Abstand von  $a_{cyl} = R/0.48$  untereinander in GaAs angeordnet. Die exzitoni-sche Resonanz ist jetzt eine Überlagerung der aus dem Abschnitt 7.2 für verschiedene festgehaltene Schwerpunkte bekannten Absorptionslinien. Da aber nur in einem sehr kleinen Bereich des Quantenfilms die lokalen Spektren aus dem Abschnitt 7.2 vom Ergebnis für den idealen Quantenfilm abweichen, unterscheidet sich die Resonanz in Abbildung 7.7 nur wenig vom Ergebnis für einen Quantenfilm ohne dielektrisch strukturierte Umgebung. Lediglich für die kleinsten Abstände  $D$  ist die Absorption auf der hochenergetischen Flanke leicht erhöht.

In der Abbildung 7.8 sind die Ergebnisse für den gleichen photonischen Kristall wie eben dargestellt, nur dass jetzt der Abstand  $D$  für alle Ergebnisse  $0.2a_B$  ist und statt dessen jetzt das Verhältnis  $R/a_{cyl}$  variiert wird. Häufig wird dieses Verhältnis

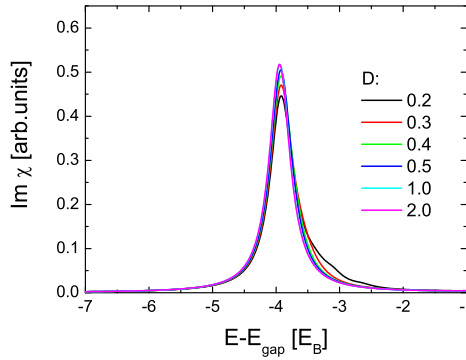


Abbildung 7.7: Exzitoniche Resonanz im linearen Spektrum für einen Quantenfilm im Abstand  $D$  zu einem photonischen Kristall aus luftgefüllten Zylindern mit  $a/c = 5$  in rechteckiger Anordnung ( $R/a_{cyl} = 0.48$ ).

nicht direkt angegeben, sondern als "filling factor"  $f$  das Verhältnis des Volumens des Zylinders zum Gesamtvolumen. Für eben begrenzte Zylinder in Rechteck-Anordnung ist  $f = \pi(R/a_{cyl})^2$ . Auch hier zeigen die Ergebnisse nur geringe Abweichungen vom idealen Ergebnis für einen Quantenfilm.

Damit scheint lineare Optik nicht geeignet, weitere Konsequenzen der Korrekturen zum gewöhnlichen Coulomb-Potential zu demonstrieren. Wie aber im Abschnitt 7.2 gezeigt wurde, ist die exzitoniche Energie im Bereich einiger 3D-Bindungsenergien vom Schwerpunkt des Elektron-Loch-Paares abhängig. Daher ist innerhalb eines Quasiteilchen-Bildes für Exzitonen zu vermuten, dass sie sich nach der Anregung inkohärent räumlich so verteilen, dass ihre jeweilige Gesamtenergie minimal ist, wobei die Lebensdauer der Exzitonen berücksichtigt werden muss. Die Ergebnisse im Abschnitt 7.2 zeigen, dass Ex-

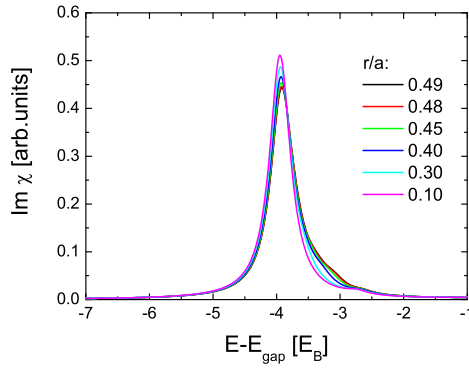


Abbildung 7.8: Exzitonische Resonanz im linearen Spektrum für einen Quantenfilm im Abstand  $D = 0.2a_B$  zu einem photonischen Kristall aus luftgefüllten Zylindern mit  $a/c = 5$  in rechteckiger Anordnung mit verschiedenen Füllfaktoren.

zitonen für  $\epsilon_{cyl} \ll \epsilon_{matrix}$  sich in Bereiche zwischen den Zylindern sammeln werden während ihre Dichte für  $\epsilon_{cyl} \gg \epsilon_{matrix}$  unterhalb der Zylinder größer als in den Zwischenräumen ist. Dieses Problem kann aber nicht im Rahmen der linearen Optik gelöst werden. Dazu muss die Paar-Korrelationsfunktion für Elektron und Loch räumlich aufgelöst untersucht werden. Dazu ist mindestens die Behandlung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen sowohl für die mikroskopische Polarisierung als auch für Elektron- und Loch-Dichten auf Hartree-Fock-Ebene unter Berücksichtigung des modifizierten Coulomb-Potentials erforderlich.

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde die Modifikation elektromagnetischer Felder durch dielektrisch strukturierte Halbleiter mit theoretischen Mitteln behandelt. Im ersten Teil der Arbeit wurde die Lokalisierung von Licht in eindimensionalen Ensembles resonanter Streuer untersucht, während im zweiten Teil photonische Kristalle Gegenstand der Untersuchung waren.

In den ersten beiden Kapiteln wurde ein eindimensionales Ensemble aus Halbleiter-Quantenfilmen theoretisch modelliert, wobei sowohl geordnete als auch ungeordnete Systeme berücksichtigt wurden. Daher konnten im ersten Teil (siehe 3.1) einige lineare optische Eigenschaften von idealen strahlungsgekoppelten Multiquantenfilm-Strukturen reproduziert werden, denn diese Systeme entsprechen bei senkrecht zu den Quantenfilmen erfolgreicher Anregung den hier untersuchten Proben.

Danach wurden Ensembles mit räumlicher oder energetischer Unordnung behandelt (siehe 3.2-3.5), um die Eigenschaften des elektromagnetischen Feldes innerhalb der Streuerkette zu untersuchen. Genügend starke Unordnung und damit ausreichend intensive Streuung klassischer Wellen führt in eindimensionalen Systemen zu lokalisierten Wellenfunktionen, wenn die Lokalisierungslänge kleiner als die Systemgröße ist. Durch die Untersuchung von Transmission und der Wellenfunktionen konnten in Multiquantenfilm-Strukturen mit großen Fluktuationen der Bandlücke lokalisierte Wellenfunktionen identifiziert werden. In Systemen mit räumlicher Unordnung wurden derartige Wellenfunktionen nicht gefunden. In diesem Punkt geht die-

se Arbeit über bisherige theoretische Untersuchungen hinaus, in denen grundlegende Eigenschaften lichtgekoppelter Quantenpunkte [43, 44] bzw. Eigenschaften von Bragg-Strukturen, realisiert als Halbleiter-Multiquantenfilme [15–17], behandelt wurden.

Das hier zu Grunde liegende Modell kann prinzipiell in vielfacher Weise weiterentwickelt werden, um weitere Bedingungen zu finden, unter denen es zur Lokalisierung von Licht in Ensembles aus resonanten Streuern kommt, und um die Eigenschaften der lokalisierten Wellenfunktionen weiter zu untersuchen:

- Die erste Möglichkeit ist die dreidimensionale Berücksichtigung des elektromagnetischen Feldes analog zu [43]. Damit erhält man eine andere Kopplung der Streuer untereinander, da die Streufelder dann Kugelwellen sind. Daher muss die Untersuchung der Transmission durch die Betrachtung des differentiellen Streuquerschnitts ersetzt werden. Außerdem kann man innerhalb eines derartigen Modells den Übergang zwischen Nahfeld- und Fernfeld-Effekten besser beobachten, da der dreidimensionale Greensche Tensor zur Lösung der Wellengleichung mehrere Anteile hat, deren relatives Gewicht je nach Streuerabstand verschieden groß ist.
- Eine zweite Möglichkeit ist die Berücksichtigung eines Resonators um die Streuer. Dieser wird die Wechselwirkung des elektromagnetischen Feldes mit den Streuern intensivieren und außerdem zur Ausbildung stehender elektromagnetischer Wellen anstelle der in den bisher behandelten Systemen in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung laufenden Wellen führen.
- Eine weitere Möglichkeit besteht darin, für die Streuer neben der Resonanz auch einen Kontrast in der statischen Dielektrizitätskonstanten anzunehmen. Typischerweise sind z.B. Halbleiter-Quantenpunkte in einer Matrix angeordnet,



---

z.B. CdSe in Glas oder InGaAs in GaAs. Dabei ist die Frage zu klären, ob dieser zweite Streumechanismus additiv zum hier behandelten hinzutritt, oder ob beide Mechanismen simultan und untrennbar wirken.

- Weiterhin können zweidimensionale Systeme mit einem äquivalenten Modell untersucht werden. Im Wesentlichen kommt eine weitere räumliche Koordinate hinzu und die Greensche Funktion zur Lösung der Wellengleichung ist eine andere. Nach der Ein-Parameter-Scaling-Theorie [3] sind auch in unendlich großen zweidimensionalen Systemen mit Unordnung alle Wellenfunktionen lokalisiert. Die zusätzliche Dimension hat den Vorteil, dass lokale Anregung, also die Anregung lediglich einzelner Quantenpunkte, möglich wird.
- Eine andere Erweiterung des Modells kann die Ankopplung von Phononenbädern an die einzelnen Streuer sein, um so bei energetischer Unordnung Energiedifferenzen zwischen den Niveaus in unterschiedlichen Streuern bei instantaner oder retardierter Dipol-Dipol-Kopplung [44] zwischen den Streuern auszugleichen. Da z.B. die Niveaus in verschieden großen Quantenpunkten durch Größenfluktuationen leicht einige hundert meV erreichen können [47], kann es erforderlich sein, Multi-Phonon-Prozesse zu berücksichtigen, weil ein einzelnes Phonon derartige Energiedifferenzen nicht ausgleichen kann.

Im zweiten Teil der Arbeit wurden erstmalig die Konsequenzen der dielektrischen Strukturierung photonischer Kristalle auf die longitudinalen Anteile des elektromagnetischen Feldes theoretisch analysiert.

Dazu wurde im Abschnitt 4 aus den Maxwell-Gleichungen für die elektromagnetischen Felder in dielektrischen Medien mit Hilfe der verallgemeinerten Coulomb-Eichung die generalisierte Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei geladenen Teilchen

in einem dielektrisch strukturierten System bestimmt. Im Abschnitt 5 wurde ein numerisches Verfahren entwickelt, das die Berechnung des generalisierten Coulomb-Potentials in dielektrischen Strukturen gestattet. Dieses Verfahren wurde im Abschnitt 6 auf einige Geometrien angewandt, um zunächst als Test des Verfahrens numerische Ergebnisse mit analytischen Resultaten zu vergleichen, und um das Coulomb-Potential zwischen zwei Ladungen in einem Dielektrikum zu bestimmen, das luftgefüllte Zylinder enthält. Die Ergebnisse der Rechnungen zeigen, dass für zwei Punktladungen unterschiedlichen Vorzeichens zum gewöhnlichen Potential der einen Punktladung eine attraktive Korrektur durch die dielektrische Strukturierung entsteht. Wenn diese Strukturierung periodisch ist, dann ist auch das generalisierte Coulomb-Potential in der gleichen Art periodisch. Das bedeutet insbesondere, dass das Coulomb-Potential in derartigen Systemen nicht mehr nur vom Abstand zwischen den beiden Ladungen abhängt, sondern sowohl von ihrem Relativvektor als auch von ihrem Schwerpunkt.

Die optischen Eigenschaften von Halbleiter-Strukturen sind besonders von den gebundenen Elektron-Loch-Paaren geprägt. Um die Auswirkungen des modifizierten Coulomb-Potentials zu demonstrieren, wurde im Abschnitt 7 die lineare mikroskopische Polarisation in einem Halbleiter-Quantenfilm in unmittelbarer Nähe zu einem zweidimensionalen photonischen Kristall berechnet, um daraus das lineare Absorptionsspektrum zu gewinnen. Diese Spektren zeigen, dass sowohl die Bindungsenergie als auch die Gesamtenergie gebundener Elektron-Loch-Paare räumlich periodisch im Bereich einiger 3D-Bindungsenergien variieren, wobei die Periodizität die gleiche wie die des photonischen Kristalls ist. Auch die Eigenschaften ungebundener Elektronen im Quantenfilm werden modifiziert, denn die Kontinuums-Absorption setzt bei kleineren Energien als im idealen Quantenfilm ein.

Diese Resultate haben weitreichende Folgen. Strukturen wie die hier modellierte werden seit einiger Zeit hergestellt [41] und

---

ihre Eignung für Halbleiter-Laser wurde demonstriert [42]. Die in dieser Arbeit gezeigten modifizierten Eigenschaften der gebundenen Elektron-Loch-Paare können dazu führen, dass ihre Dichte räumlich moduliert ist, denn sie werden sich dort aufhalten, wo ihre Energie minimal ist. Wenn sich ein derartiges räumliches Gitter ausbildet, so wird dies die optischen Eigenschaften z.B. der vorgeschlagenen Laser beeinflussen. Um diese Frage endgültig zu klären, muss die hier behandelte Struktur aus Halbleiter-Quantenfilm und zweidimensionalem photonischem Kristall mit Methoden der nichtlinearen Halbleiter-Optik behandelt werden.

Eine weitere Möglichkeit, um die Berechnung der optischen Eigenschaften realistischer zu gestalten, ist die selbstkonsistente Lösung von Material- und Feldgleichungen anstelle des homogenen externen Feldes wie es hier verwendet wurde. Die Lösung der Feldgleichungen für die transversalen Anteile des elektromagnetischen Feldes ist in der Vergangenheit eingehend untersucht worden [64], so dass die Lösung an sich kein größeres Problem darstellt. Erst die simultane Berücksichtigung der Material- und Feldgrößen ist für die momentan verfügbaren Computer ein zu ambitioniertes Vorhaben.

# A Vektorfelder

In diesem Anhang sollen zwei in der Elektrodynamik sehr wichtige Sätze für vektorwertige Funktionen aufgeführt werden, die auch in den analytischen Betrachtungen dieser Arbeit eine wichtige Rolle spielen.

## 1. Zerlegungssatz für Vektorfelder

Eine vektorwertige Funktion  $\vec{a}(\vec{r}, t)$  lässt sich als Summe zweier vektorwertiger Funktionen  $\vec{a}_l(\vec{r}, t)$  und  $\vec{a}_t(\vec{r}, t)$  zerlegen:

$$\vec{a}(\vec{r}, t) = \vec{a}_l(\vec{r}, t) + \vec{a}_t(\vec{r}, t) \quad (\text{A.1})$$

wobei  $\vec{a}_l(\vec{r}, t)$  und  $\vec{a}_t(\vec{r}, t)$  folgenden Bedingungen genügen:

$$\nabla \times \vec{a}_l(\vec{r}, t) = 0 \Rightarrow \exists \alpha(\vec{r}, t) : \vec{a}_l(\vec{r}, t) = \nabla \alpha(\vec{r}, t) \quad (\text{A.2})$$

$$\nabla \cdot \vec{a}_t(\vec{r}, t) = 0 \Rightarrow \exists \vec{\beta}(\vec{r}, t) : \vec{a}_t(\vec{r}, t) = \nabla \times \vec{\beta}(\vec{r}, t) \quad (\text{A.3})$$

## 2. Gaußscher Satz

Der Satz von Gauß ist ein wichtiges Hilfsmittel, um Volumen- und Oberflächenintegrale einer vektorwertigen Funktion  $\vec{a}(\vec{r}, t)$  ineinander umzuwandeln:

$$\int_V d^3r \nabla \cdot \vec{a}(\vec{r}, t) = \int_{\partial V} \vec{a}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{f} \quad (\text{A.4})$$

wobei  $\vec{a}(\vec{r}, t)$  ausreichend differenzierbar sein muss,  $\partial V$  eine geschlossene Oberfläche von  $V$  und  $d\vec{f}$  ein nach außen orientiertes Flächenelement von  $\partial V$  sind.

## B Elektromagnetische Potentiale

In diesem Anhang sollen die elektromagnetischen Potentiale  $\phi(\vec{r}, t)$  und  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  aus den Maxwell-Gleichungen abgeleitet werden. Das skalare Potential  $\phi(\vec{r}, t)$  spielt eine wichtige Rolle bei der Berechnung der Modifikationen des Coulomb-Potentials durch dielektrische Strukturierung eines Volumen-Halbleiters. Das Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  ist bei der Betrachtung der transversalen Felder in einem photonischen Kristall wichtig und ist daher nur der Vollständigkeit halber hier aufgeführt.

### Skalares Potential

Aus (4.2) und (A.3) folgt

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (\text{B.1})$$

und mit (4.3)

$$\nabla \times \left( \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \partial_t \vec{A}(\vec{r}, t) \right) = 0 \quad (\text{B.2})$$

Mit (A.2) folgt

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = - \left( \nabla \phi(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \partial_t \vec{A}(\vec{r}, t) \right) \quad (\text{B.3})$$

Verwendung von (4.6) ergibt

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = -\varepsilon(\vec{r}) \left( \nabla \phi(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \partial_t \vec{A}(\vec{r}, t) \right) \quad (\text{B.4})$$

Daraus, mit (4.1) und der generalisierten Coulomb-Eichung

$$\nabla \cdot [\varepsilon(\vec{r}) \vec{A}(\vec{r}, t)] = 0 \quad (\text{B.5})$$

folgt die Poisson-Gleichung für das skalare Potential

$$-\nabla \cdot [\varepsilon(\vec{r}) \nabla \phi(\vec{r}, t)] = 4\pi\rho(\vec{r}, t) \quad (\text{B.6})$$

Wäre in dieser Betrachtung die übliche Coulomb-Eichung

$$\nabla \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{B.7})$$

verwendet worden, dann folgt aus (4.1) und (B.4)

$$-\nabla \varepsilon(\vec{r}) (\nabla \phi(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \partial_t \vec{A}(\vec{r}, t)) = 4\pi\rho(\vec{r}, t) \quad (\text{B.8})$$

Mit (B.7) erhält man bei Abwesenheit von Ladungen, also  $\rho(\vec{r}, t) = 0$ :

$$-\nabla \varepsilon(\vec{r}) \nabla \phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} [\nabla \varepsilon(\vec{r})] \partial_t \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{B.9})$$

Dieses Ergebnis bedeutet, dass erstens auch bei Abwesenheit von Ladungen das skalare Potential nicht verschwindet und zweitens, dass das Vektorpotential auch longitudinale Anteile hat.

Diese zwei unerwünschten Auswirkungen zeigen die Wichtigkeit der generalisierten Coulomb-Eichung (B.5), mit der die Analogie zwischen den hier benötigten Gleichungen für inhomogene Systeme und den üblichen Gleichungen für homogene Systeme weitgehend aufrecht erhalten werden kann.

### Vektorpotential

Mit (B.1) und (4.8) folgt für das Vektorpotential:

$$\mu \vec{H}(\vec{r}, t) = \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (\text{B.10})$$

Die Maxwellgleichung (4.4) in der Form

$$\nabla \times \mu \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{4\pi\mu}{c} \vec{j}(\vec{r}, t) + \frac{\mu}{c} \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t) \quad (\text{B.11})$$

und (B.4) ergeben

$$\nabla \times \mu \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{4\pi\mu}{c} \vec{j}(\vec{r}, t) - \frac{\varepsilon(\vec{r})\mu}{c} \nabla \partial_t \phi - \frac{\varepsilon(\vec{r})\mu}{c^2} \partial_t^2 \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (\text{B.12})$$

---

und schließlich mit (B.10)

$$(\nabla \times \nabla \times + \varepsilon(\vec{r}) \frac{\mu}{c^2} \partial_t^2) \vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{4\pi\mu}{c} \vec{j}(\vec{r}, t) - \frac{\varepsilon(\vec{r})\mu}{c} \nabla \partial_t \phi \quad (\text{B.13})$$

wobei die rechte Seite bis auf den Vorfaktor genau dem transversalen Anteil des Stroms entspricht [58]:

$$(\nabla \times \nabla \times + \varepsilon(\vec{r}) \frac{\mu}{c^2} \partial_t^2) \vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{4\pi\mu}{c} \vec{j}_t(\vec{r}, t) \quad (\text{B.14})$$

so dass jetzt mit (B.5), (B.6), (B.14) die Potentiale und damit die Felder überall im Raum bestimmt sind.

# C Details zur Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung in photonischen Kristallen

In diesem Anhang sind die bei der Modellierung der verschiedenen Geometrien im Abschnitt 6 verwendeten Koordinatensysteme, Normalenvektoren, Flächenelemente für Oberflächenintegrale und die damit berechneten Kerne der Integralgleichung (4.22) aufgeführt.

## C.1 Dielektrische Kugel

Der Symmetrie angepasste Koordinaten sind Kugelkoordinaten.

- Koordinatentransformation:

$$\begin{aligned}x &= r \sin \vartheta \cos \varphi \\y &= r \sin \vartheta \sin \varphi \\z &= r \cos \vartheta\end{aligned}\tag{C.1}$$

- Wertebereich:

$$\begin{aligned}0 &\leq r \leq \infty \\0 &\leq \vartheta \leq \pi \\0 &\leq \varphi \leq 2\pi\end{aligned}\tag{C.2}$$



Hier geht es nur um die Oberfläche der Kugel, also ist

$$r = R = \text{const.} \quad (\text{C.3})$$

- Normalenvektor:

$$\begin{aligned} \vec{e}_r = & \vec{e}_x \sin \vartheta \cos \varphi + \\ & \vec{e}_y \sin \vartheta \sin \varphi + \\ & \vec{e}_z \cos \vartheta \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

- Faktoren für tangenciales Flächenelement  $d\vartheta d\varphi$ :

$$\begin{aligned} V &= 1/r \\ W &= \frac{1}{r \sin \vartheta} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

- Kern: Mit den Definitionen:

$$\begin{aligned} dx &= R \sin \vartheta \cos \varphi - R \sin \vartheta' \cos \varphi' \\ dy &= R \sin \vartheta \sin \varphi - R \sin \vartheta' \sin \varphi' \\ dz &= R \cos \vartheta - R \cos \vartheta' \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

folgt:

$$\begin{aligned} K(\varphi, \vartheta, \varphi', \vartheta') = & \\ & - \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} \\ & R^2 \sin \vartheta' \frac{[dx^2 + dy^2 + dz^2]^{3/2}}{\sin \vartheta'} = \quad (\text{C.7}) \\ & - \frac{2\sqrt{2}\sqrt{1 - \cos \vartheta \cos \vartheta' - \cos(\varphi - \varphi') \sin \vartheta \sin \vartheta'}}{\sin \vartheta'} \end{aligned}$$

Auch dieser Kern ist wie im Falle der zwei dielektrischen Halbräume (siehe Abschnitt 6.1) diagonal singular. Allerdings erfüllt (C.7) nicht die Bedingungen (6.5) und (6.6).

Man kann aber zeigen, dass sich (C.7) in zwei Teile zerlegen lässt, einen  $\delta$ -artigen Term und eine Korrektur dazu. Dazu wird der Kern für die Kugelgeometrie

$$K_{sph}(\vec{r}, \vec{r}') = -\vec{e}_r \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (\text{C.8})$$

nicht für  $\vec{r}$ , sondern für einen Ortsvektor  $\vec{r}_\varepsilon$  ausgewertet, der von  $\vec{r}$  ausgehend infinitesimal um das "mathematische  $\varepsilon$ " in Richtung des Normalenvektors  $\vec{e}_r$  verschoben ist:

$$K_{sph}(\vec{r}_\varepsilon, \vec{r}') = -\vec{e}_r \cdot \frac{\vec{r}_\varepsilon - \vec{r}'}{|\vec{r}_\varepsilon - \vec{r}'|^3} \quad (\text{C.9})$$

Mit  $\vec{r}_\varepsilon = \vec{r} + \varepsilon \vec{e}_r$  ist

$$\begin{aligned} -\vec{e}_r \cdot (\vec{r}_\varepsilon - \vec{r}') &= -(R + \varepsilon) + \vec{e}_r \cdot \vec{r}' \\ &= -(R + \varepsilon) + \frac{\vec{r}_\varepsilon}{R + \varepsilon} \cdot \vec{r}' \\ &= -\frac{1}{2(R + \varepsilon)} [2(R + \varepsilon)^2 - 2\vec{r}_\varepsilon \cdot \vec{r}'] \\ &= -\frac{1}{2(R + \varepsilon)} [\underbrace{(R + \varepsilon)^2}_{\vec{r}_\varepsilon^2} - 2\vec{r}_\varepsilon \cdot \vec{r}' + \underbrace{R^2}_{\vec{r}^2} + 2R\varepsilon + \varepsilon^2] \\ &= -\frac{1}{2(R + \varepsilon)} [(\vec{r}_\varepsilon - \vec{r}')^2 + 2R\varepsilon + \varepsilon^2] \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

und letztlich

$$K_{sph}(\vec{r}_\varepsilon, \vec{r}') = -\frac{1}{2(R + \varepsilon)} \frac{1}{|\vec{r}_\varepsilon - \vec{r}'|} - \frac{R\varepsilon}{R + \varepsilon} \frac{1}{|\vec{r}_\varepsilon - \vec{r}'|^3} \quad (\text{C.11})$$

wobei der in  $\varepsilon$  quadratische Term vernachlässigt wurde. Für den zweiten Term kann analytisch gezeigt werden, dass er (6.5) und (6.6) erfüllt, daher ist

$$K_{sph}(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{2R} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - 2\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{C.12})$$

Für die Matrixgleichung (5.22) bedeutet dieses Ergebnis, dass auf der Diagonalen der Term  $1 + \lambda J(x_j) - \lambda I(x_j)$  durch  $1 + 2\pi\lambda + \lambda J(x_j) - \lambda I(x_j)$  zu ersetzen ist. Berücksichtigt man im ersten Summanden in  $K_{sph}(\vec{r}, \vec{r}')$  noch den Faktor  $1/(VW)$  für das tangential Flächenelement der Kugeloberfläche, dann kann die oben für Kugelkoordinaten abgeleitete Form  $K(\varphi, \vartheta, \varphi', \vartheta')$  für den Kern in der Matrixgleichung (5.22) verwendet werden.

## C.2 Dielektrischer Zylinder ohne Boden

Für den Zylindermantel sind Zylinderkoordinaten der Symmetrie angepasste Koordinaten.

- Koordinatentransformation:

$$\begin{aligned}x &= \rho \cos \varphi \\y &= \rho \sin \varphi \\z &= z\end{aligned}\tag{C.13}$$

- Wertebereich:

$$\begin{aligned}0 &\leq r \leq \infty \\0 &\leq \varphi \leq 2\pi \\-\infty &\leq z \leq \infty\end{aligned}\tag{C.14}$$

Hier soll aber ein endlicher Zylinder behandelt werden, damit der Quantenfilm weiterhin als ideales zweidimensionales System behandelt werden kann, also ist

$$0 \leq z \leq \infty\tag{C.15}$$

Außerdem geht es hier um die Oberfläche des Zylinders, also ist

$$\rho = R = \text{const.}\tag{C.16}$$

- Normalenvektor:

$$\vec{e}_\rho = \vec{e}_x \cos \varphi + \vec{e}_y \sin \varphi \quad (\text{C.17})$$

- Faktoren für tangenciales Flächenelement  $d\varphi dz$ :

$$\begin{aligned} V &= 1/\rho \\ W &= 1 \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

- Kern: Mit den Definitionen

$$\begin{aligned} dx &= R \cos \varphi - R \cos \varphi' \\ dy &= R \sin \varphi - R \sin \varphi' \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

folgt:

$$\begin{aligned} K(\varphi, z, \varphi' z') &= R \frac{- \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix}}{[dx^2 + dy^2 + (z - z')^2]^{3/2}} \\ &= R^2 \frac{1 - \cos(\varphi - \varphi')}{[2R^2 - 2R^2 \cos(\varphi - \varphi') + (z - z')^2]^{3/2}} \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

Wie schon bei der Kugel muss die Bedeutung des Ausdrucks

$$-\vec{e}_\rho \cdot \nabla \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{C.21})$$

genauer untersucht werden, wenn sich sowohl  $\vec{r}$  als auch  $\vec{r}'$  auf dem Zylindermantel bewegen. Eine Ableitung analog zu der im Anhang C.1 führt auf

$$K_{\text{cyl}}(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{2R} \frac{|\rho - \rho'|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} - 2\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{C.22})$$

wobei hier  $\vec{\rho} = (\rho, \varphi)_{pol} = (\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi)_{cart}$  der zu  $\vec{r} = (\rho, \varphi, z)_{cyl} = (\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi, z)_{cart}$  gehörende Vektor in ebenen Polarkoordinaten ist. Setzt man im ersten Term für  $\vec{r}$  und  $\vec{r}'$  Zylinderkoordinaten ein und berücksichtigt den Faktor  $1/(VW)$  für das tangentielle Flächenelement auf dem Zylindermantel, so erhält man für den ersten Term (C.20).

### C.3 Dielektrischer Zylinder mit flachem Boden

- Angepasste Koordinaten sind ebene Polarkoordinaten  $(\rho, \varphi)$  mit für den Boden und Zylinderkoordinaten  $(\rho, \varphi, z)$  für den Mantel (zu den Koordinaten siehe auch den Anhang C.2).

- Der Kern

$$K_{z\rho}(\vec{r}, \vec{r}') = R\vec{e}_z \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (C.23)$$

wobei  $\vec{r}$  auf dem Boden liegt und  $\vec{r}'$  über den Mantel läuft, lässt sich darstellen als

$$K_{z\rho}(\rho, \varphi, \varphi', z') = R \frac{-z'}{[\rho^2 + R^2 - 2\rho R \cos(\varphi - \varphi') + z'^2]^{3/2}} \quad (C.24)$$

- Der Kern

$$K_{\rho z}(\vec{r}, \vec{r}') = \rho'(-\vec{e}_\rho) \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (C.25)$$

wobei  $\vec{r}$  auf dem Mantel liegt und  $\vec{r}'$  über den Boden läuft, lässt sich darstellen als

$$K_{\rho z}(\varphi, z, \rho', \varphi') = -\rho' \frac{R - \rho' \cos(\varphi - \varphi')}{[\rho'^2 + R^2 - 2\rho' R \cos(\varphi - \varphi') + z^2]^{3/2}} \quad (C.26)$$

## C.4 Dielektrischer Zylinder mit Halbkugel

- Die verwendeten Koordinaten sind Zylinderkoordinaten  $(\rho, \varphi, z)$  für den Mantel und Kugelkoordinaten  $(r, \vartheta, \varphi)$  für die untere Halbkugel, also ist  $\vartheta$  auf das Intervall  $[\pi/2, \pi]$  beschränkt (siehe zu den Koordinatensystemen auch die Anhänge C.1 und C.2).

- Der Kern

$$K_{rp}(\vec{r}, \vec{r}') = R \frac{-\vec{e}_r(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (\text{C.27})$$

wobei  $\vec{r}$  auf der Halbkugel liegt und  $\vec{r}'$  über den Mantel läuft, lässt sich darstellen als

$$K_{rp}(\varphi, \vartheta, \varphi', z') = -R \frac{R(\cos(\varphi - \varphi') \sin \vartheta - 1) + z' \cos \vartheta}{[2R^2(1 - \cos(\varphi - \varphi') \sin \vartheta) - 2Rz' \cos \vartheta + z'^2]^{3/2}} \quad (\text{C.28})$$

was sich weiter vereinfacht, wenn man  $z'$  in Einheiten von  $R$  zählt.

- Der Kern

$$K_{\rho r}(\vec{r}, \vec{r}') = R^2 \sin \vartheta' \frac{-\vec{e}_\rho(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (\text{C.29})$$

wobei  $\vec{r}$  auf dem Mantel liegt und  $\vec{r}'$  über die Halbkugel läuft, lässt sich darstellen als

$$K_{\rho r}(\varphi, z, \varphi', \vartheta') = R^3 \sin \vartheta' \frac{\cos(\varphi - \varphi') \sin \vartheta'}{[2R^2(1 - \cos(\varphi - \varphi') \sin \vartheta') - 2Rz \cos \vartheta' + z^2]^{3/2}} \quad (\text{C.30})$$

und ist ebenfalls weiter zu vereinfachen, wenn man eine neue Variable  $s$  mit  $s = z/R$  einführt.

## C.5 Dielektrisches flaches Rotationsellipsoid

Für das flache Rotationsellipsoid sind folgende elliptische Koordinaten der Symmetrie angepasst:

- Koordinatentransformation:

$$\begin{aligned}x &= l \sqrt{(1 - \eta^2)(1 + \xi^2)} \cos \varphi \\y &= l \sqrt{(1 - \eta^2)(1 + \xi^2)} \sin \varphi \\z &= l \xi \eta\end{aligned}\tag{C.31}$$

mit  $\xi = \text{const.}$ ,  $l = \text{const.}$

- Wertebereich:

$$\begin{aligned}0 &\leq \xi \leq \infty \\-1 &\leq \eta \leq 1 \\0 &\leq \varphi \leq 2\pi\end{aligned}\tag{C.32}$$

- Normalenvektor:

$$\begin{aligned}\vec{e}_\xi &= \vec{e}_x \xi \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 + \eta^2}} \cos \varphi + \\&\vec{e}_y \xi \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 + \eta^2}} \sin \varphi + \\&\vec{e}_z \eta \sqrt{\frac{1 + \xi^2}{\xi^2 + \eta^2}}\end{aligned}\tag{C.33}$$

- Faktoren für tangenciales Flächenelement  $d\eta d\varphi$ :

$$V = \frac{1}{l} \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 + \eta^2}} \quad (C.34)$$

$$W = \frac{1}{l \sqrt{(1 + \xi^2)(1 - \eta^2)}}$$

- Kern: Auch in diesem Fall zerfällt der Kern in zwei Summanden, einen  $\delta$ -artigen Term und eine Korrektur dazu. Letztere ist:

$$K(\varphi, \eta, \varphi', \eta') = \frac{\xi(1 + \xi^2) \sqrt{\eta'^2 + \xi^2} [-1 + \eta\eta' + \dots \dots \dots \sqrt{\eta^2 + \xi^2} [-2 + \eta^2 + \eta'^2 + 2(-1 + \eta\eta')\xi^2 + \dots \dots \dots \sqrt{(1 - \eta^2)(1 - \eta'^2)} \cos(\varphi - \varphi')] \dots + 2\sqrt{(1 - \eta^2)(1 - \eta'^2)}(1 + \xi^2) \cos(\varphi - \varphi') \Big]^{3/2}}{\dots} \quad (C.35)$$

Um den  $\delta$ -artigen Term zu identifizieren, müssen wieder die zwei Bedingungen (6.5) und (6.6) herangezogen werden. Im Gegensatz zu den zwei dielektrischen Halbräumen und zur dielektrischen Kugel ist das Integral im zweiten Kriterium (6.6) nicht mehr überall auf der Oberfläche des Ellipsoids analytisch lösbar. Numerische Integration für verschiedene Halbachsenverhältnisse  $a/c$  und für verschiedene infinitesimale Verschiebungen  $\varepsilon$  lieferte jedoch an allen untersuchten Punkten auf der Oberfläche das Ergebnis  $2\pi$ .

## C.6 Dielektrischer Zylinder mit flachem Rotationsellipsoid

- Die verwendeten Koordinaten sind Zylinderkoordinaten  $(\rho, \varphi, z)$  für den Mantel und elliptische Koordinaten



$(\xi, \varphi, \eta)$  mit dem Parameter  $l$  für das untere halbe Rotationsellipsoid, also ist  $\eta$  auf das Intervall  $[0, -1]$  beschränkt (siehe zu den Koordinatensystemen auch die Anhänge C.2 und C.5).

- Der Kern

$$K_{\xi\rho}(\vec{r}, \vec{r}') = R \frac{-\vec{e}_{\xi}(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (\text{C.36})$$

wobei  $\vec{r}$  auf dem Ellipsoid liegt und  $\vec{r}'$  über den Mantel läuft, lässt sich darstellen als

$$\begin{aligned} K_{\xi\rho}(\varphi, \eta, \varphi', z') = & \\ & - \frac{R}{\sqrt{\eta^2 + \xi^2}} \frac{l\xi(\eta^2 - 1)\sqrt{(\xi^2 + 1)} + \dots}{[R^2 + z'^2 - 2\eta l z' \xi + l^2(1 - \eta^2 + \xi^2) + \dots]} \\ & \frac{\dots + \eta(z' + \eta l \xi)\sqrt{1 + \xi^2} - R\xi\sqrt{1 - \eta^2}\cos(\varphi - \varphi')}{\dots + 2lR\sqrt{(1 - \eta^2)(1 + \xi^2)}\cos(\varphi - \varphi')} \Big]^{3/2} \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

- Der Kern

$$K_{\rho\xi}(\vec{r}, \vec{r}') = l^2 \sqrt{(\xi^2 + \eta'^2)(1 + \xi^2)} \frac{-\vec{e}_{\rho}(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (\text{C.38})$$

wobei  $\vec{r}$  auf dem Mantel liegt und  $\vec{r}'$  über das Ellipsoid läuft, lässt sich darstellen als

$$\begin{aligned} K_{\rho r}(\varphi, z, \varphi', \vartheta') = & -l^2 \sqrt{(1 + \xi^2)(\eta'^2 + \xi^2)} \\ & \frac{\cos \varphi (R \cos \varphi - l \sqrt{(1 - \eta'^2)(1 + \xi^2)} \cos \varphi') + \dots}{\left[ (R \cos \varphi - l \sqrt{(1 - \eta'^2)(1 + \xi^2)} \cos \varphi')^2 + \dots \right.} \\ & \left. \dots + \sin \varphi (R \sin \varphi - l \sqrt{(1 - \eta'^2)(1 + \xi^2)} \sin \varphi') \right.} \\ & \left. \dots + (R \sin \varphi - l \sqrt{(1 - \eta'^2)(1 + \xi^2)} \sin \varphi')^2 + (z - \eta l \xi)^2 \right]^{3/2}} \end{aligned} \quad (\text{C.39})$$

# Literaturverzeichnis

- [1] U. Kuhl. *Mikrowellenuntersuchungen an eindimensionalen Streusystemen und in zweidimensionalen Kavitäten*. Dissertation, Philipps-Universität Marburg, 1998.
- [2] P.W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, **109**:1492, 1958.
- [3] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Liciardello, and T.V. Ramakrishnan. Scaling theory of localization – absence of quantum diffusion in 2 dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **42**:673–676, 1979.
- [4] C.A. Condat and T.R. Kirkpatrick. Resonant scattering and Anderson localization of acoustic waves. *Phys. Rev. B*, **36**:6782–6793, 1987.
- [5] M.B. van der Mark, M.P. van Albada, and A. Lagendijk. Light scattering in strongly scattering media: Multiple scattering and weak localization. *Phys. Rev. B*, **37**:3575–3592, 1988.
- [6] J. Kroha, C.M. Soukoulis, and P. Wölfe. Localization of classical waves in a random medium: A self-consistent theory. *Phys. Rev. B*, **47**:11093–11096, 1993.
- [7] A. Figotin and A. Klein. Localization of classical waves II: Electromagnetic waves. *Commun. Math. Phys.*, **184**:411–441, 1997.

- [8] P. de Vries and D.V. van Coevorden. Point scatterers for classical waves. *Rev. Mod. Phys.*, **70**:447–466, 1998.
- [9] M.C.W. van Rossum and T.M. Nieuwenhuizen. Multiple scattering of classical waves: microscopy, mesoscopy and diffusion. *Rev. Mod. Phys.*, **71**:313–371, 1999.
- [10] B. Ellatari and T. Kottos. One-dimensional localization in the presence of resonances. *Phys. Rev. B*, **59**:R5265–R5268, 1999.
- [11] R. Dalichaouch, J.P. Armstrong, S. Schultz, P.M. Platzman, and S.L. McCall. Microwave localization by two-dimensional random scattering. *Nature*, **354**:53–55, 1991.
- [12] D.S. Wiersma, P. Bartolini, A. Lagendijk, and R. Righini. Localization of light in a disordered medium. *Nature*, **390**:671–673, 1997.
- [13] F. Scheffold, R. Lenke, R. Tweert, and G. Maret. Localization or classical diffusion of light? *Nature*, **398**:206–207, 1999.
- [14] T. Guhr, A. Müller-Groeling, and H.A. Weidenmüller. Random matrix theories in quantum physics: Common concepts. *Physics Reports*, **299**:189–425, 1998.
- [15] Tineke Stroucken. *Coherent Dynamics of Radiatively Coupled Quantum Well Excitons*. Dissertation, Philipps-Universität Marburg, 1996.
- [16] S. Haas. *Theorie intensitätsabhängiger Propagationseffekte in Mehrfach-Quantenfilm-Strukturen*. Dissertation, Philipps-Universität Marburg, 1998.
- [17] B. Grote. *Einfluss von Unordnung auf die optischen Eigenschaften von Halbleiter-Heterostrukturen*. Dissertation, Philipps-Universität Marburg, 1999.

- [18] E. Yablonovitch. Inhibited sponaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, **58**:2059–2062, 1987.
- [19] S. John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, **58**:2486–2489, 1987.
- [20] U. Grüning, V. Lehmann, S. Ottow, and K. Busch. Macroporous silicon with a complete two-dimensional photonic band gap centered at  $5\mu\text{m}$ . *Appl. Phys. Lett.*, **68**:747–749, 1996.
- [21] P.L. Gourley, J.R. Wendt, G.A. Vawter, T.M. Brennan, and B.E. Hammons. Optical properties of 2-dimensional photonic lattices fabricated as honeycomb nanostructures in compound semiconductors. *Appl. Phys. Lett.*, **64**:687–689, 1994.
- [22] K.M. Ho, C.T. Chan, and C.M. Soukoulis. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. *Phys. Rev. Lett.*, **65**:3152–3155, 1990.
- [23] S.Y. Lin, J.G. Fleming, D.L. Hetherington, B.K. Smith, R. Biswas, K.M. Ho, M.M. Sigalas, W.Zubrzycki, S.R. Kurtz, and J. Bur. A three-dimensional photonic crystal operating at infrared wavelengths. *Nature*, **394**:251–253, 1998.
- [24] A. Chelnokov, K. Wang, S. Rowson, P. Garoche, and J.M. Lourtioz. Near-infrared yablonovite-like photonic crystals by focused-ion-beam etching of macroporous silicon. *Appl. Phys. Lett.*, **77**:2943–2945, 2000.
- [25] S.Y. Lin and J.G. Fleming. A three-dimensional optical photonic crystal. *IEEE J. Lightwave Tech.*, **17**:1944–1947, 1999.
- [26] K. Busch and S. John. Liquid-crystal photonic-band-gap materials: The tunable electromagnetic vacuum. *Phys. Rev. Lett.*, **83**:967–970, 1999.

- [27] S.W. Leonard, J.P. Mondia, H.M. van Driel, O. Toader, S. John, K. Busch, A. Birner, U. Gösele, and V. Lehmann. Tunable two-dimensional photonic crystals using liquid-crystal infiltration. *Phys. Rev. B*, **61**:R2389–R2392, 2000.
- [28] M. Boroditsky, T.F. Krauss, R. Coccioli, R. Vrijen, R. Bhat, and E. Yablonovitch. Light extraction from optically pumped light-emitting diode by thin-slab photonic crystals. *Appl. Phys. Lett.*, **75**:1036–1038, 1997.
- [29] A.A. Erchak, D.J. Ripin, S. Fan, P. Rakich, J.D. Joannopoulos, E.P. Ippen, G.S. Petrich, and L.A. Kolodziejski. Enhanced coupling to vertical radiation using a two-dimensional photonic crystal in a semiconductor light-emitting diode. *Appl. Phys. Lett.*, **78**:563–565, 2001.
- [30] M. Imada, S. Noda, A. Chutinan, T. Tokuda, M. Murata, and G. Sadaki. Coherent two-dimensional lasing action in surface-emitting laser with triangular-lattice photonic crystal structure. *Appl. Phys. Lett.*, **75**:316–318, 1999.
- [31] J.-K. Hwang, H.-Y. Ryu, D.-S. Song, I.-Y. Han, H.-W. Song, H.-G. Park, Y.-H. Lee, and D.-H. Jang. Room-temperature triangular-lattice two-dimensional photonic band gap lasers operating at  $1.54\mu\text{m}$ . *Appl. Phys. Lett.*, **76**:2982–2984, 2000.
- [32] D.-S. Song, S.-H. Kim, H.-G. Park, C.-K. Kim, and Y.-H. Lee. Single-fundamental-mode photonic-crystal vertical-cavity surface-emitting lasers. *Appl. Phys. Lett.*, **80**:3901–3903, 2002.
- [33] E.R. Brown, C.D. Parker, and E. Yablonovitch. Radiation properties of a planar antenna on a photonic-crystal substrate. *J. Opt. Soc. Am. B*, **10**:404–407, 1993.
- [34] J.C. Knight, T.A. Birks, P.S. Russell, and D.M. Atkin. All-silica single-mode optical fiber with photonic crystal cladding. *Optics Lett.*, **21**:1547–1549, 1996.

- [35] A. Mekis, J.C.Chen, I. Kurland, S.Fan, P.R. Villeneuve, and J.D. Joannopoulos. High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides. *Phys. Rev. Lett.*, **77**:3787–3790, 1996.
- [36] J.V. Sanders. Diffraction of light by opals. *Acta Cryst. A*, **24**:427–434, 1968.
- [37] R.B. Morris. Iridescence from diffraction structures in the wing scales of *Callophrys rubi*, the green hairstreak. *J. Ent. (A)*, **49**:149–154, 1975.
- [38] H. Ghiradella. Light and color on the wing: Structural colors in butterflies and moths. *Applied Optics*, **30**:3492–3500, 1991.
- [39] H. Ghiradella. Shining armor: Structural colors in insects. *Optics and Photonic News*, **10**, 3:46–48, 1999.
- [40] A. Tip. Canonical formalism and quantization for a class of classical fields with application to radiative atomic decay in dielectrics. *Phys. Rev. A*, **56**:5022–5041, 1997.
- [41] D. Labilloy, H. Benisty, C. Weisbuch, T.F. Krauss, R.M. De La Rue, V. Bardinal, R. Houdré, U. Oesterle, D. Cassagne, and C. Jouanin. Quantitative measurement of transmission, reflection, and diffraction of two-dimensional photonic band gap structures at near-infrared wavelengths. *Phys. Rev. Lett.*, **79**:4147–4150, 1997.
- [42] S. Noda, N. Yamamoto, M. Imada, H. Kobayashi, and M. Okano. Alignment and stacking of semiconductor photonic bandgaps by wafer-fusion. *IEEE J. Lightwave Tech.*, **17**:1948–1955, 1999.
- [43] M. Möller. Dynamik optischer Anregung in Ensembles lichtgekoppelter Quantenpunkte. Diplomarbeit, Philipps-Universität Marburg, 1999.

- [44] P. Thomas, M. Möller, R. Eichmann, T. Meier, T. Stroucken, and A. Knorr. Microscopic foundation of the Förster excitonic energy transfer process. *Phys. stat. sol. (b)*, **230**:25–29, 2002.
- [45] J.D. Jackson. *Klassische Elektrodynamik*. De Gruyter, Berlin, New York, 1983.
- [46] F. Remacle, C.P. Collier, G. Markovich, J.R. Heath, U. Banin, and R.D. Levine. Networks of quantum nanodots: The role of disorder in modifying electronic and optical properties. *J. Phys. Chem. B*, **102**:7727–7734, 1998.
- [47] L. Bányai and S.W. Koch. *Semiconductor Quantum Dots, Atomic, Molecular and Optical Physics*, Band 2. World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1993.
- [48] B. Kramer and A. MacKinnon. Localization: Theory and experiment. *Reports on Progress in Physics*, **56**:1469–1564, 1993.
- [49] A. Kudrolli, V. Kidambi, and S. Sridhar. Experimental studies of chaos and localization in quantum wave functions. *Phys. Rev. Lett.*, **75**:822–825, 1995.
- [50] H.J. Stöckmann, M. Barth, U. Dörr, U. Kuhl, and H. Schanze. Microwave studies of chaotic billiards and disordered systems. *Physica E*, **9**:571–577, 2001.
- [51] K. Müller, B. Mehlig, F. Milde, and M. Schreiber. Statistics of wave functions in disordered and in classically chaotic systems. *Phys. Rev. Lett.*, **78**:215–218, 1997.
- [52] M. Janssen. Statistics and scaling in disordered mesoscopic electron systems. *Physics Reports*, **295**:1–91, 1998.
- [53] A.D. Mirlin. Statistics of energy levels and eigenfunctions in disordered systems. *Physics Reports*, **326**:259–382, 2000.

- [54] K.B. Efetov. Supersymmetry and theory of disordered metals. *Advances in Physics*, **32**:53–127, 1983.
- [55] H.J. Stöckmann. A supersymmetry approach to billiards with randomly distributed scatterers. *Journal of Physics A*, **35**:5165–5179, 2002.
- [56] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Harry Deutsch, Thun, Frankfurt am Main, 1993.
- [57] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flanery. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [58] W. Nolting. *Grundkurs: Theoretische Physik*, Band 3: Elektrodynamik. Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1993.
- [59] K. Rottmann. *Mathematische Formelsammlung*, BI Hochschultaschenbücher, Band 13. Bibliographisches Institut, Mannheim, 1989.
- [60] D. B. Tran Thoai, R. Zimmermann, M. Grundmann, and D. Bimberg. Image charges in semiconductor quantum wells: Effect on exciton binding energy. *Phys. Rev. B*, **42**:5906–5909, 1990.
- [61] H. Haug and S.W. Koch. *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1994.
- [62] C. Leforestier, R.H. Bisseling, C. Cerjan, M.D. Feit, R. Friesner, A. Guldberg, A. Hammerich, G. Jolicard, W. Karrlein, H.-D. Meyer, N. Lipkin, O. Roncero, and R. Kosloff. A comparison of different propagation schemes for the time dependent Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.*, **94**:59–80, 1991.



- [63] M. Kira, I. Tittonen, and S. Stenholm. Two-electron semiconductor gate. *Phys. Rev. B*, **52**:10972–10978, 1995.
- [64] J.D. Joannopoulos, R.D. Meade, and J.N. Winn. *Photonic crystals: Molding the flow of light*. Princeton University Press, Princeton, 1995.

# Eigene Veröffentlichungen

## **Zu Ensembles resonanter Streuer**

- P. Thomas, M. Möller, R. Eichmann, T. Meier, T. Stroucken, and A. Knorr. Microscopic Foundation of the Förster Excitonic Energy Transfer Process. *Phys. Stat. Sol. B*, **230**:25–29, 2002.

## **Zur Coulomb-Wechselwirkung in photonischen Kristallen**

- R. Eichmann, B. Pasenow, T. Meier, T. Stroucken, P. Thomas, and S.W. Koch. Semiconductor Excitons in Photonic Crystals. Akzeptiert zum *7th International Workshop on Non-linear Optics and Excitation Kinetics in Semiconductors*.
- R. Eichmann, B. Pasenow, T. Meier, T. Stroucken, P. Thomas, and S.W. Koch. Semiconductor Absorption in Photonic Crystals. *Appl. Phys. Lett.*, **82** (3):355–357, 2003.
- S.W. Koch, T. Stroucken, R. Eichmann, M. Kira, and W. Hoyer. Exciton Effects in Photonic Crystal Structures. *Optics and Photonic News*, **13** (12):48–49, 2002.
- T. Stroucken, R. Eichmann, L. Banyai, and S.W. Koch. Excitons in Photonic Crystals. *J. Opt. Soc. A. B*, **19**:2292–2296, 2002. Ebenfalls veröffentlicht in: *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, **6**, 2002.

## Weitere Veröffentlichungen

- S.A. Tarasenko, A.A. Kiselev, E.L. Ivchenko, A. Dinger, M. Baldauf, H. Kalt, S.D. Baranovskii, R. Eichmann, and P. Thomas. Energy Relaxation of Localized Excitons at Finite Temperature. *Semicond. Sci. Tech.*, **16**:486–492, 2001.
- J.E. Golub, R. Eichmann, G. Strasser, G. Bernatz, S. Nau, W. Stolz, and P. Thomas. Observations of Interaction-Assisted Hopping Transport in GaAs/Gal(1-x)Al(x)As Quantum Wells. *J. Lumin.*, **91**:7–12, 2000.
- J.E. Golub, R. Eichmann, and P. Thomas. Observations of a Glass Transition in a Quasi-Two-Dimensional Electron-Hole System, *Europhys. Lett.*, **48**:194–200, 1999.
- J.E. Golub, R. Eichmann, and P. Thomas. Dimensional Crossover of Exciton Hopping Relaxation in Mesoscopic Structures. *Europhys. Lett.*, **47**:628–632, 1999.

# Danksagung

Diese Arbeit wäre ohne die Unterstützung vieler Mitarbeiter und Freunde nicht entstanden.

Zuerst danke ich meinem Doktorvater Peter Thomas, der mich seit meinem Eintritt in die Arbeitsgruppe als AG-Praktikant immer unterstützt und gefördert hat. Die wissenschaftlichen Diskussionen, der Einsatz für meine Mitarbeiterstelle, aber auch gemeinsame Unternehmungen auf persönlicher Ebene in Israel, in Ungarn und in Marburg haben mir in den letzten Jahren viel bedeutet.

Dank gebührt ebenso Stephan Koch als Leiter der Arbeitsgruppe, sowohl für die Diskussionen zum Thema "Photonische Kristalle" als auch für fortwährende Unterstützung und dauerhaftes Vertrauen in Fragen der Computerorganisation in der Arbeitsgruppe.

Florian Gebhardt danke ich für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Ich bedanke mich bei Tineke, Torsten und Bernhard für viele wertvolle wissenschaftliche Diskussionen, die das Vorankommen bei der Bearbeitung der beiden Projekte erheblich beschleunigt haben.

Christian, Matthias und Walter danke ich für alles, was das Leben in der Arbeitsgruppe neben der Wissenschaft in den letzten drei Jahren angenehm gemacht hat und noch immer macht. Das gilt auch für Hans Christian, Bernd Hanewinkel, Bernd Grote, Stefan, Marc und Steffen, die die AG in dieser Zeit verlassen haben.

Schließlich danke ich Meike für ihre andauernde Unterstützung im privaten Leben und ganz besonders dafür, dass sie die Last des Pendelns auf sich genommen hat, damit wir unser Leben gemeinsam gestalten können.

Zu guter Letzt danke ich dem SFB 383 *Unordnung in Festkörpern auf mesoskopischen Skalen*, dem Graduiertenkolleg *Optoelektronik mesoskopischer Halbleiter* und dem European Graduate College *Many-particle interactions in solids* für großzügige Unterstützung.

# Wissenschaftlicher Werdegang

**seit 01.09.98** Wissenschaftlicher Mitarbeiter in der AG Halbleitertheorie, Philipps-Universität Marburg.

**10/92-07/98** Studium der Physik an der Philipps-Universität Marburg.

04.10.94 Diplom-Vorprüfung.

24.07.98 Abschluss mit Diplomprüfung.